UNTERSUCHUNGEN ZUM PLASMA-MIKROFELD MIT HILFE VON COMPUTERSIMULATIONEN

INAUGURAL-DISSERTATION

zur Erlangung des Doktorgrades
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Universität Düsseldorf

vorgelegt von

GÜNTHER OTTERSBACH

aus Düsseldorf

Düsseldorf 1983

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41543909_0020

UNTERSUCHUNGEN ZUM PLASMA-MIKROFELD MIT HILFE VON COMPUTERSIMULATIONEN

INAUGURAL-DISSERTATION

zur Erlangung des Doktorgrades
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Universität Düsseldorf

vorgelegt von

GÜNTHER OTTERSBACH

aus Düsseldorf

Düsseldorf 1983

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

1. Berichterstatter: Prof. Dr. R.W. Larenz

2. Berichterstatter: Prof. Dr. K. Suchy

3. Berichterstatter: Priv.-Doz. Dr. J. Seidel

Tag der mündlichen Prüfung: 10. Februar 1983

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung und Problemstellung 1

2 Zur Theorie des Plasma-Mikrofeldes 7
2.1 "Nearest-neighbour"-Theorie 8
2.2 Holtsmark-Theorie 10
2.2.1 Berechnung der Holtsmark-Verteilung 10
2.2.2 Beschränkung auf endliche Teilchenzahlen N 13
2.2.3 Beschränkung auf einen endlichen Feldstärkenbereich 15
2.3 Weitere "Nahfeld-Theorien" 18
2.4 Fernfeldtheorie nach Hunger-Larenz 20
2.5 Auswirkungen eines geladenen Aufpunkts 29

3 Computersimulationen zum Mikrofeld 32
3.1 Monte-Carlo-Simulation 32
3.1.1 Beschreibung des Verfahrens 33
3.1.2 Auswertung und Vergleich mit der Theorie 35
3.1.3 Einfluß geänderter Simulationsbedingungen 45
3.1.3.1 Einfluß der Geometrie 47
3.1.3.2 Einfluß von Ladungsschwankungen 49
3.2 Erweiterung der Monte-Carlo-Simulation zur Bestimmung der Dipolmomentdichte 52
3.2.1 Beschreibung des Verfahrens 52
3.2.2 Auswertung und Vergleich mit der Theorie 53
3.3 "Molecular-Dynamics"-Simulation 56
3.3.1 Beschreibung des Verfahrens 57
3.3.2 Auswertung und Vergleich mit der Theorie 63
3.3.3 Einfluß geänderter Simulationsbedingungen 66
3.3.3.1 Einfluß der Wechselwirkung 66
3.3.3.2 Einfluß des Massenverhältnisses 68
3.3.3.3 Einfluß der Randbedingungen 68
3.4 Erweiterung der "Molecular-Dynamics"-Simulation zur Bestimmung des Mikrofeldes an einem geladenen Aufpunkt 72
3.4.1 Beschreibung des Verfahrens 72
3.4.2 Auswertung und Vergleich mit der Theorie 72

4 Die zeitliche Autokorrelationsfunktion des Mikrofeldes 76
4.1 Theoretische Ansätze 77
4.2 Auswertung der Simulationsdaten 80
4.3 Vergleich mit der Theorie 82

5 Zusammenfassung und Ausblick 89

Anhang
A Entwicklung der Holtsmark-Verteilung für große N 93
B Voraussetzungen für die Simulation 95
C Normierung der benutzten Größen 97
D Erzeugung gleichverteilter Zufallszahlen 100
E Erzeugung normalverteilter Zufallszahlen 102

Literaturverzeichnis 105

Kapitel 1

Einleitung und Problemstellung

Die Plasmaphysik hat heute - insbesondere wegen der Möglichkeit der Energiegewinnung durch Kernfusion - große Bedeutung gewonnen. Im Rahmen der experimentellen Plasmaphysik ist die Bestimmung des Plasmazustands eine wichtige Teilaufgabe. Die dazu nötigen Meßverfahren sollten möglichst geringe Rückwirkungen auf das Plasma ausüben; außerdem sollte ein wohldefinierter Zusammenhang zwischen der gemessenen Größe und den zu bestimmenden Plasmaparametern bestehen. Als geeignetes Verfahren bietet sich die spektroskopische Untersuchung der vom Plasma emittierten Strahlung an, in der beispielsweise die Spekrallinienverbreiterung und -verschiebung gemessen werden kann.

Die Verbreiterung der Spektrallinien durch den interatomaren Stark-Effekt sowie viele weitere Plasmaphänomene beruhen letztendlich auf dem durch die geladenen Plasmateilchen hervorgerufenen elektrischen Feld, welches Mikrofeld genannt wird.

Die Wahrscheinlichkeitsdichte des Mikrofeldes (genaueres in Kapitel 2), allgemein kurz als Mikrofeldverteilung bezeichnet, wird schon im Jahre 1919 von Holtsmark /1, 2/ für ein Ensemble von Punktladungen ohne Wechselwirkung berechnet. Seit dem Erscheinen dieser Arbeiten fehlt es nicht an Versuchen, die für die Holtsmark-Verteilung auftretende Divergenz des zweiten Moments (siehe Abschnitt 2.2) zu vermeiden. Schon ein Jahr nach der Publikation seines Doktoranden Holtsmark bemerkt Debye /3/, daß diese Divergenz von der Physik her schwer verständlich sei und er zur Korrektur die Berücksichtigung der Molekülradien vorschlage. Dies versucht Gans /4/ im Jahre

1921, indem er um den Aufpunkt ein "Ausschließungsvolumen" ansetzt, welches für große Feldstärken zu einer Gaußverteilung des Mikrofeldes führt. Dadurch angeregt bemüht sich Holtsmark /5/ später, allgemein den endlichen Durchmesser von Molekülen zu berücksichtigen. Die neue Feldverteilung wird jedoch aufgrund notwendiger Näherungen nur für "kleine und mittlere Werte" der Feldstärke (Holtsmark /5/, Seite 80) als anwendbar befunden.

Chandrasekhar /6/ berechnet im Jahre 1943 die Wahrscheinlichkeitsdichte des Gravitationsfeldes in einem Sternhaufen mit der "Markoff-Methode". Da das Gravitationsfeld dem gleichen Abstandsgesetz wie das Coulombfeld folgt, sollten beide die gleiche Feldverteilung haben. Tatsächlich erhält Chandrasekhar eine Holtsmark-Verteilung, zu der er ausdrücklich bemerkt (/6/, Seite 73), daß die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten hoher Feldstärken von dieser Verteilung und auch von der recht ähnlichen "nearest-neighbour"-Verteilung (siehe Abschnitt 2.1) viel zu groß angeben wird, wodurch dann das zweite Moment nicht existiert.

Seit etwa 1955 versuchen verschiedene Autoren, durch Einbeziehen der Wechselwirkung zwischen den Ladungen das Problem des Mikrofeldes im Plasma zu lösen. Eine ausführliche, kommentierte Literaturliste für den Zeitraum bis 1964 ist in der Arbeit von Weise /7/ zu finden. Von diesem Zeitpunkt an seien zunächst die weiteren Arbeiten von Weise /8, 9/ sowie die Veröffentlichungen von Kelbg /10/, Dalenoort /11/, Rand /12/, Ecker /13/ und Hooper /14/ erwähnt, denen allen gemeinsam ist, daß selbst die unterschiedlichsten Ansätze nur kleine Änderungen an der Holtsmarkschen Form der Mikrofeldverteilung bewirken, aber am prinzipiellen Verhalten dieser Verteilung (und damit auch an der Divergenz des zweiten Moments) nichts ändern. In diesem Zusammenhang ist die schon von Weise zitierte Arbeit von Engelmann /15/ zu nennen, die zeigt, daß auch eine quantenmechanische Berechnung in der dort angegebenen Form nicht zur Behebung dieser Divergenz führt.

Nur die Verteilung des Mikropotentials wird übereinstimmend von mehreren Autoren (Morita /16/, Larenz /17/, Alyamovskii /18/, Hunger und Larenz /19/, Weise/7/) als gaußverteilt angegeben.

Im Jahre 1961 geben Hunger und Larenz /20/, veranlaßt durch astrophysikalische Fragestellungen bezüglich der Spektral-

Linien-Verbreiterung /21/, zum ersten Mal eine völlig unterschiedliche Verteilung für das Mikrofeld an, indem sie dieses für eine mikrokanonische Gesamtheit berechnen. Dabei kommt die Energiedichte des elektrischen Feldes, welche durch das mittlere Feldstärkenquadrat gegeben ist, ins Spiel. Da ein abgeschlossenes System geladener Teilchen eine konstante und insbesondere endliche Gesamtenergie besitzen sollte, müssen aus allen von Holtsmark berücksichtigten Ladungskonfigurationen diejenigen ausgeschlossen werden, die den Energiesatz verletzen. Es können also nicht alle gleich großen Volumenelemente des Plasmas für alle Teilchen gleichzeitig in der von Holtsmark angegebenen Weise die gleichen Besetzungswahrscheinlichkeiten aufweisen, worauf noch zurückzukommen sein wird. Für die Hunger-Larenzsche Mikrofeldverteilung ergibt sich nichts anderes als die kanonische Verteilung der elektrostatischen Feldenergie pro durch den mittleren Teilchenabstand gebildete Elementarvolumenzelle, also eine Gaußverteilung bzw. Gauß-Maxwell-Verteilung (bei der natürlich alle Momente endlich sind). Ferner ergibt sich nach /20/ insbesondere die Proportionalität des mittleren Feldstärkenquadrats zur Temperatur und zum vierten Moment des Mikropotentials /19/. Eine Gaußverteilung wurde auf anderem Weg auch von Hettner und Wagner /22/ für die Fourierkomponenten des Mikrofeldes hergeleitet; Gans /4/ und sogar Holtsmark selbst (/5/, Seite 73) erwarteten es nicht anders. Wie Larenz ferner zeigt /17/, läßt sich die genannte Temperaturabhängigkeit des mittleren Feldstärkenquadrats auch über die Nyquist-Beziehung für die elektrische Rauschspannung /23/ verstehen, ebenso wie sich dabei in zwangloser Weise die Debye-Länge λ_D (siehe Anhang C) ergibt, und zwar auch für Plasmabedingungen, bei denen diese Länge von der gleichen Größenordnung wie der mittlere Teilchenabstand $n^{-1/3}$ (siehe Abschnitt 2.1) resultiert (vorher nur unter der Voraussetzung $\lambda_D \gg n^{-1/3}$ herleitbar).

In einer weiteren Untersuchung zeigen Hunger und Larenz /24/, daß der Grund für das bei allen anderen Theorien übersehene Gaußsche Verhalten der Mikrofeldverteilung in der Sensitivität der Feldkräfte des weitreichenden Coulombfeldes (genauer: aller Kräfte, die mit dem Abstand wie $r^{-\nu}$ mit $\nu < 3$ abfallen) gegen geringfügige Abweichungen von der Ergodizität zu suchen ist. Mathematisch bedeutet dies im Fall des Mikrofeldes (vgl. dazu die ausführliche Diskussion in /24/), daß

bei der Berechnung nach Holtsmark (siehe Abschnitt 2.2) beim Übergang zum Limes beliebig großer Ausdehnung des Systems eine nichtgleichmäßige Konvergenz auftritt, was sich in der Nichtvertauschbarkeit dieses Grenzprozesses mit Integrationen zeigt und sich physikalisch als gegebenfalls beliebig starker Feldbeitrag aus dem unendlich fernen Raum äußert, wie es schon potentialtheoretisch vom Gravitationsfeld eines unendlich ausgedehnten Sternsystems bekannt war.

Für das wechselwirkungsfreie Plasma ergibt sich nach Durchführung des Grenzübergangs in korrekter Weise nach /24/ eine Faltung der Holtsmarkschen "Nahfeld"-Verteilung mit einer Gaußschen "Fernfeld"-Verteilung, wobei letztere zu einer Verbreiterung der Mikrofeldverteilung im Vergleich zur Holtsmark-Verteilung führt, insbesondere für heiße und dünne Plasmen. Als quantitatives Maß für die Abweichung von der Ergodizität könnte das Verhältnis der Zahl der Teilchen, welche zum Fernfeld beitragen, zur Zahl aller Teilchen dienen /24, 25/. Bemerkenswert ist ferner die in diesem Zusammenhang zum ersten Mal gezeigte und zwanglos folgende Proportionalität zwischen dem mittlerem Fernfeldquadrat und dem mittleren Quadrat der Dipolmomentdichte /24/.

Anwendungen dieser Theorie in Bezug auf die Verbreiterung der Spektrallinien durch den Stark-Effekt und auf die Transportkoeffizienten im Plasma wurden bereits 1964 studiert /26/ und dann insbesondere 1974 von Seidel /27/ sowie 1981 von Semlyen /28/.

Um eine unabhängige Überprüfung von Mikrofeld-Rechnungen durchführen zu können, wurde schon bald nach dem Aufkommen elektronischer Digitalrechner die numerische Simulation von Plasmen durch Koller /29/ vorgeschlagen. Es ist der Vorteil dieser Untersuchungsmethode, daß sie eine - bis auf Rundungsfehler durch die endliche Genauigkeit des Rechenwerks - im Prinzip exakte Berechnung des N-Körper-Problems und damit auch eine exakte Bestimmung der statistischen Eigenschaften des simulierten Ensembles liefern kann. Eine praktische Einschränkung erfährt diese Methode jedoch durch die real immer begrenzte Leistung der zur Verfügung stehenden Rechenanlagen, denn aufgrund des Aufwandes, der bei der N-Teilchen-Wechselwirkung getrieben werden muß, sind auch heute nur Systeme mit bis zu einigen hundert Teilchen simulierbar. Wird diese Zahl in Beziehung gesetzt zu Verhältnissen in natür-

lichen Plasmen, beispielsweise im Plasma der Sonnenkorona, wo sich in einer "Debye-Sphäre" (siehe Anhang C) etwa 10^9 Teilchen befinden und viele dieser Sphären miteinander in Wechselwirkung stehen, so wird deutlich, daß mit den heute verfügbaren Möglichkeiten eine völlig realitätskonforme Simulation nicht durchgeführt werden kann. Deshalb wurde unter Ausnutzung der Gleichheit von Zeit- und Scharmittel in ergodischen Systemen von Koller /29/ eine andere Methode vorgeschlagen, welche gegebenenfalls unter Vernachlässigung der Wechselwirkung eine wesentlich höhere Teilchenzahl zu simulieren erlaubt. Leider liefert dieses Verfahren jedoch keine Aussagen über zeitabhängige Größen.

Weitere Möglichkeiten zur Plasma-Simulation sind in dem von Alder, Fernbach und Rotenberg herausgegebenen Sammelband /30/ beschrieben.

Alle diese Simulationsverfahren führten nicht nur in der Plasmaphysik zu wichtigen Ergebnissen; sie werden auch in weiten Bereichen von Physik, Astronomie, Technik und Mathematik erfolgreich eingesetzt. Ihren bedeutenden Einfluß auf die theoretische Physik hebt z.B. Prigogine /31/ hervor.

Zum Plasma-Mikrofeld sind zahlreiche Computerexperimente von Wilke /32 - 36/ sowie von Fluck /37/ und Kreitz /38, 39/ durchgeführt worden. Für solche Simulationen mit endlicher Teilchenzahl N ohne Berücksichtigung der Wechselwirkung geben Hunger und Larenz in /24/ und /40/ die Abhängigkeit der nach ihren Vorstellungen berechneten Momente von N an, um damit Einsicht in die Größenordnung der zu erwartenden Fernfeldbeiträge zu erhalten.

Im einzelnen baut Wilke auf den von Koller /29/ vorgeschlagenen grundlegenden Prinzipien der Plasmasimulation auf. Wegen der geringen Leistungsfähigkeit des damals benutzten Rechners hat Koller nur wenige Plasmateilchen simuliert, wobei die statistischen Auswertungen aufgrund der geringen Zahl der Experimente mit großen Schwankungen behaftet waren. Erst Wilke kann fast zehn Jahre später, wie detailliert in /36/ dargestellt, die mittlerweile erhöhte Rechnerleistung nutzen, um erstmals nicht nur die zunächst interessierenden thermodynamischen Variablen, wie Temperatur, Druck, potentielle Energie, Schwankungen von Dichte sowie kinetischer Energie ausführlich zu untersuchen, sondern auch Impuls- und Energie-Relaxationszeiten sowie insbesondere die elektrischen Größen eines Plas-

mas, beispielsweise die Mikrofeldverteilung und einige ihrer Momente, einige Momente des Mikropotentials sowie die zeitliche Autokorrelationsfunktion des Mikrofeldes. Die erwähnten thermodynamischen Größen zeigten bei den Simulationen ein plausibles Verhalten, und Wilke hat die bei Berücksichtigung der Wechselwirkung zwischen den Plasmateilchen im Vergleich mit der Holtsmark-Theorie für endliche Teilchenzahlen (siehe Abschnitt 2.2.2) stattfindende Verschiebung des Maximums der Mikrofeldverteilung zu höheren Werten hin ebenso nachgewiesen wie einen von Hunger und Larenz (vgl. /36/) angegebenen Verlauf der Autokorrelationsfunktion.

Fluck und Kreitz haben einige Jahre später zeitunabhängige Simulationen des Mikrofeldes mit noch höheren Teilchenzahlen durchgeführt, wobei sich für den wechselwirkungsfreien Fall die Trends im Sinne der Hunger-Larenzschen Theorie verstärkten, aber durch die weiterhin begrenzten Rechnerleistungen konnte der Fernfeldeinfluß noch nicht in quantitativer Weise bestätigt werden.

In der vorliegenden Arbeit sind sowohl statische als auch dynamische Simulationsmethoden eingesetzt worden, um einige Eigenschaften des Mikrofeldes zu untersuchen, für die verschiedene Theorien unterschiedliche Ergebnisse liefern, deren experimentelle Überprüfung zumindest zur Zeit nicht möglich ist. Besonderer Wert ist dabei auf die Teilchenzahlabhängigkeit der Mikrofeldeigenschaften gelegt worden; aber auch Einflüsse der Berandung des Simulationsvolumens sowie der Wechselwirkung und der Teilchenmasse auf das Mikrofeld wurden untersucht.

Im folgenden zweiten Kapitel werden zunächst die bereits angedeuteten Unterschiede zwischen den vorliegenden Theorien zum Mikrofeld im einzelnen dargelegt. Anschließend sind im dritten Kapitel die Simulationen und ihre Ergebnisse für einen ungeladenen Punkt im Plasma sowie die Erweiterung auf einen geladenen Aufpunkt beschrieben. Im vierten Kapitel wird die zeitliche Autokorrelationsfunktion des Mikrofeldes diskutiert. Fragestellungen im Rahmen möglicher Variationen zu diesen Untersuchungen werden bei den jeweiligen Kapiteln besprochen. Einige Voraussetzungen zur Simulation sowie Überlegungen zur Erzeugung geeigneter digitaler Zufallszahlen, deren Qualität für die Simulationen von entscheidender Bedeutung ist, finden sich im Anhang.

Kapitel 2

Zur Theorie des Plasma-Mikrofeldes

Das Mikrofeld $\vec{E}(\vec{r})$ an einem Aufpunkt $\vec{r}_o$ berechnet sich als Summe der von den N einzelnen Ladungsträgern, die sich momentan an den Orten $\vec{r}_j$ befinden, an diesem Aufpunkt erzeugten elektrostatischen Feldstärken punktförmiger Ladungen:

$$\vec{E}(\vec{r}_0) = \sum_{j=1}^{N} \vec{E}(\vec{r}_j, \vec{r}_o) \tag{2.1}$$

Hier interessiert insbesondere die Wahrscheinlichkeitsdichte des Mikrofeldes $W(\vec{E})$, welche die Wahrscheinlichkeit $W(\vec{E}) \cdot d\vec{E}$ (mit $d\vec{E}$ sei $dE_x \cdot dE_y \cdot dE_z$ abgekürzt) bestimmt, daß das Mikrofeld einen Wert aus $d\vec{E}$ um $\vec{E}$ annimmt.

$W(\vec{E})$ wird in der physikalischen Literatur meist als Mikrofeldverteilung bezeichnet. Da dieser Ausdruck allgemein gebräuchlich ist und im vorliegenden Zusammenhang nicht zu Mißverständnissen Anlaß geben kann, soll er auch im folgenden beibehalten werden.

Unter den im Anhang B erwähnten Bedingungen schreibt sich die Mikrofeldverteilung in bekannter Weise mit Hilfe der δ-Funktion als

$$W(\vec{E}) = \frac{\int_{(6N)} \int \delta\left(\vec{E} - \sum_{j=1}^{N} \vec{E}(\vec{r}_j)\right) e^{-\frac{H}{k_B T}} \, d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_N \cdot d\vec{p}_1 \cdots d\vec{p}_N}{\int_{(6N)} \int e^{-\frac{H}{k_B T}} \, d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_N \cdot d\vec{p}_1 \cdots d\vec{p}_N} \tag{2.2}$$

mit der Hamilton-Funktion H als Summe aus kinetischer und potentieller Energie U,

$$H = \sum_{j=1}^{N} \frac{\vec{p}_j^{\,2}}{2m_j} + U(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) \,, \tag{2.3}$$

wenn als statistische Gewichtsfunktion für den Fall des thermodynamischen Gleichgewichts die kanonische Verteilung, also ein Boltzmann-Faktor angesetzt wird. Da für ein klassisches System von Punktladungen (vgl. z.B. /41/) Integrale mit $e^{-\frac{H}{k_B T}}$ wegen $U \to -\infty$ (in nicht integrabler Weise) nicht existieren, und ihre Auswertung unter Beibehaltung der kanonischen Verteilung nur mit Abschneideprozeduren und ähnlichen "Verfahren" gelingt, soll hier eine allgemeine, integrable Gewichtsfunktion $\tilde{F}(\vec{r}_1, \ldots, \vec{p}_N)$ statt des Boltzmann-Faktors benutzt werden, womit aus Gleichung 2.2 wird:

$$(2.4) \quad W(\vec{E}) = \frac{\int^{(6N)} \int \delta\left(\vec{E} - \sum_{j=1}^{N} \vec{E}(\vec{r}_j)\right) \tilde{F}(\vec{r}_1, \ldots, \vec{p}_N)\, d\vec{r}_1 \ldots d\vec{p}_N}{\int^{(6N)} \int \tilde{F}(\vec{r}_1, \ldots, \vec{p}_N)\, d\vec{r}_1 \ldots d\vec{p}_N}$$

Die Integration über den Impulsraum kann, falls wie bei der kanonischen Verteilung

$$(2.5) \quad \tilde{F}(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N, \vec{p}_1, \ldots, \vec{p}_N) = F(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) \cdot G(\vec{p}_1, \ldots, \vec{p}_N)$$

gilt, sofort ausgeführt werden. Es bleibt:

$$(2.6) \quad W(\vec{E}) = \frac{\int^{(3N)} \int \delta\left(\vec{E} - \sum_{j=1}^{N} \vec{E}(\vec{r}_j)\right) F(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N)\, d\vec{r}_1 \ldots d\vec{r}_N}{\int^{(3N)} \int F(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N)\, d\vec{r}_1 \ldots d\vec{r}_N}$$

Eine Auswertung dieses Ausdrucks kann unter verschiedenen Annahmen erfolgen; dabei sind also unterschiedliche theoretische Ansätze zu unterscheiden.

2.1 "Nearest-Neighbour"-Theorie

Die einfachste Möglichkeit zur Berechnung des Mikrofeldes besteht darin, nur das Feld des dem Aufpunkt nächsten Nachbarn zu berücksichtigen ("nearest-neighbour"-Theorie /6/).

Da die Wahrscheinlichkeit $W(r) \cdot dr$, das nächste Teilchen in einem Abstand zwischen r und r + dr vom Aufpunkt $r_o = 0$ zu finden, gleich ist der Wahrscheinlichkeit, kein Teilchen zwischen 0 und r zu finden, multipliziert mit der Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen zwischen r und r + dr zu finden, folgt

bei Voraussetzung einer der Größe des Volumenelements proportionalen Aufenthaltswahrscheinlichkeit bei der Teilchendichte n die Integralgleichung

$$W(r)\,dr = 4\pi n r^2\,dr\left(1-\int_0 W(r')\,dr'\right) \tag{2.7}$$

mit der Lösung

$$W(r) = 4\pi n r^2\, e^{-\frac{4\pi}{3} n r^3}. \tag{2.8}$$

Mit dieser Verteilung berechnet sich der mittlere Abstand des nächsten Nachbarn vom Aufpunkt zu

$$\langle r\rangle = \int_0^\infty r\,W(r)\,dr = \frac{\Gamma\left(\frac{4}{3}\right)}{3\left(\frac{4\pi}{3}\right)^{\frac{1}{3}}} n^{-1/3} \approx 0{,}554\, n^{-1/3}. \tag{2.9}$$

Von ähnlicher Größenordnung ist der mittlere Abstand zwischen zwei Teilchen, der mit dem Wert $n^{-1/3}$ im folgenden in Anlehnung an die Literatur /42/ verwendet werden soll, da er als durch die Teilchendichte n gegebener Parameter offensichtlich die Größenordnung der Feldstärken wesentlich bestimmt. (An dieser Stelle sei auf eine weitere Arbeit von Gans /43/ hingewiesen, in der Gleichung 2.8 für endliche Teilchendurchmesser verallgemeinert wird.)

Für Coulomb-Felder, von denen hier nur der Betrag der durch ein Teilchen mit der Ladung $\pm e_o$ erzeugten Feldstärke interessiert, ist

$$E = \frac{e_o}{r^2} \quad \text{bzw.} \quad dE = -2\,\frac{e_o}{r^3}\,dr. \tag{2.10}$$

Damit ergibt sich aus Gleichung 2.8 für die Wahrscheinlichkeitsdichte $W_{nn}(E)$ des elektrischen Feldes, das vom nächsten Nachbarteilchen erzeugt wird:

$$W_{nn}(E) = 2\pi n\,\frac{e_o^{3/2}}{E^{5/2}}\, e^{-\frac{4\pi}{3} n \left(\frac{e_o}{E}\right)^{3/2}} \tag{2.11}$$

Wenn das Feld E auf die sog. Normalfeldstärke

$$E_o^* = \frac{e_o}{r_o^{*2}} = \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{2/3} e_o\, n^{2/3} \tag{2.12}$$

mit

$$r_o^* = \left(\frac{4\pi}{3} n\right)^{-1/3} \tag{2.13}$$

bezogen wird und als dimensionslose Feldstärkenvariable

$$\beta = \frac{E}{E_o^*} \tag{2.14}$$

eingeführt wird (siehe z.B. /42/), ergibt sich schließlich die sog. "nearest-neighbour"-Mikrofeldverteilung

$$H_{nn}(\beta) = \frac{3}{2}\beta^{-5/2} e^{-\beta^{-3/2}} \tag{2.15}$$

mit dem Median $\beta_{MED,nn} = 1{,}277$ und dem Mittelwert $\langle\beta_{nn}\rangle = 2{,}678$ sowie divergierenden höheren Momenten. Für $\beta \gg 1$ gilt die Reihenentwicklung

$$H_{nn}(\beta) = \frac{3}{2}\beta^{-5/2}\left(1 - \beta^{-3/2} + \frac{1}{2}\beta^{-3} - \dots\right). \tag{2.16}$$

2.2 Holtsmark-Theorie

Die erste Mehrteilchen-Theorie zur Mikrofeldverteilung wurde im Jahre 1919 von Holtsmark /1/ angegeben.

2.2.1 Berechnung der Holtsmark-Verteilung

Unter der Annahme statistisch unabhängiger Teilchen mit $F \equiv 1$ vereinfacht sich Gleichung 2.6 für Coulombfelder zu

$$W(\vec{E}) = V^{-N}\int^{(3N)}\int \delta\left(\vec{E} - \sum_{j=1}^{N}\frac{e_j}{r_j^3}\vec{r}_j\right) d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N \; . \tag{2.17}$$

Der Übergang zur Fourier-Transformierten $A(\vec{k})$ liefert ein Produkt aus N gleichen Integralen:

$$\begin{aligned} A(\vec{k}) &= \int e^{i\vec{k}\vec{E}}\, W(\vec{E})\, d\vec{E} \\ &= V^{-N}\int^{(3N)}\int e^{-i\vec{k}\cdot\sum_{j=1}^{N}\frac{e_j}{r_j^3}\vec{r}_j}\, d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N \\ &= \left(\frac{1}{V}\int e^{-i\frac{e_j}{r_j^3}\vec{k}\cdot\vec{r}}\, d\vec{r}\right)^N \end{aligned} \tag{2.18}$$

Durch die Einführung von sphärischen Polarkoordinaten kann Gleichung 2.18 leicht ausgewertet werden; dabei wird die radiale Integration zunächst zwischen R_o und R ($R_o < R$) ausgeführt

(d.h. $V = \frac{4\pi}{3}\,(R^3 - R_0^3)$):

$$(2.19)\quad [A(K)]^{1/N} = \frac{1}{V}\int_{R_0}^{R}\int_{0}^{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} e^{i\frac{e_0}{r^2}K\sin\theta}\cdot r^2\sin\theta\;d\varphi\,d\theta\,dr$$

$$= \frac{4\pi}{V}\int_{R_0}^{R}\frac{r^4}{e_0K}\sin\frac{e_0K}{r^2}\,dr$$

Wird dieses Integral in zwei Teile aufgespalten,

$$(2.20)\quad \int_{R_0}^{R}\frac{r^4}{e_0K}\sin\frac{e_0K}{r^2}\,dr = \int_{R_0}^{R} r^2\,dr - \int_{R_0}^{R} r^2\left(1-\frac{r^2}{e_0K}\sin\frac{e_0K}{r^2}\right)dr,$$

so ist das erste Integral gleich dem betrachteten Volumen V dividiert durch 4π. Nach der Substitution

$$(2.21)\quad z = \frac{e_0K}{r^2}$$

und mit den Abkürzungen

$$(2.22)\quad z_0 = \frac{e_0K}{R_0^2} \qquad \text{und} \qquad z_1 = \frac{e_0K}{R^2}$$

läßt sich das zweite Integral schreiben als

$$(2.23)\quad \int_{R_0}^{R} r^2\left(1-\frac{r^2}{e_0K}\sin\frac{e_0K}{r^2}\right)dr = \frac{1}{2}(e_0K)^{3/2}\int_{z_1}^{z_0}\left(1-\frac{\sin z}{z}\right)z^{-5/2}\,dz\,.$$

Das verbleibende Integral läßt sich auf das Fresnel-Integral /44/

$$(2.24)\quad C_1(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\int_0^x \cos t^2\,dt$$

zurückführen. Mit der Teilchendichte n = N/V (n = const) ergibt sich schließlich als Fourier-Transformierte

$$(2.25)\quad A(K) = \left[1-\frac{2\pi n}{N}(e_0K)^{3/2}\cdot\left(\frac{2}{3}\cdot\left(z_n^{-3/2}-z_0^{-3/2}\right)+\right.\right.$$

$$+\frac{2}{5}\left(\frac{\sin z_0}{z_0^{5/2}}-\frac{\sin z_1}{z_1^{5/2}}\right)+\frac{4}{15}\left(\frac{\cos z_0}{z_0^{3/2}}-\frac{\cos z_1}{z_1^{3/2}}\right)-$$

$$\left.\left.-\frac{8}{15}\left(\frac{\sin z_0}{z_0^{1/2}}-\frac{\sin z_1}{z_1^{1/2}}\right)+\frac{8}{15}\sqrt{2\pi}\left[C_1\left(z_0^{1/2}\right)-C_1\left(z_1^{1/2}\right)\right]\right)\right]^N$$

Die Grenzübergänge $R_0 \to 0$, d.h. $z_0 \to \infty$, und $R = \left(\frac{3}{4\pi h}N\right)^{1/3} \to \infty$, d.h. $z_1 \to 0$, (wegen der Problematik des letzteren Grenzprozesses siehe Abschnitt 2.4 und die dort zitierte Literatur), ergeben mit

$$(2.26)\quad \lim_{N\to\infty}\left(1+\frac{x}{N}\right)^N = e^x$$

für A(k) eine Exponentialfunktion:

(2.27) $$A_H(K) = e^{-\frac{4}{15}(2\pi)^{3/2}(e_0 K)^{3/2}\cdot n}$$

Die übliche Normierung /42/ erfolgt auf die Feldstärke

(2.28) $$E_0 = \frac{e_0}{r_0^2} = 2\pi\left(\frac{4}{15}\right)^{2/3} e_0 n^{2/3}$$

mit

(2.29) $$r_0 = (2\pi)^{-1/2}\left(\frac{4}{15}\right)^{-1/3} n^{-1/3}$$

(Hier ist

(2.30) $$E_0 \approx 2{,}6031 \cdot e_0 n^{2/3} \quad ,$$

für die "nearest-neighbour"-Theorie gilt nach Gleichung 2.12

(2.31) $$E_0^* \approx 2{,}5985 \cdot e_0 n^{2/3} \quad ,$$

insgesamt ist also näherungsweise

(2.32) $$E_0 \approx E_0^* \approx 2{,}60 \cdot e_0 n^{2/3}\ ).$$

Damit schreibt sich Gleichung 2.27:

(2.33) $$A_H(K) = e^{-(E_0 K)^{3/2}}$$

Die Rücktransformation

(2.34) $$W(\vec{E}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{-i\vec{K}\vec{E}} A(\vec{K})\, d\vec{K}$$

läßt sich wegen A = A(k) mit $k = |\vec{k}|$ und $E = |\vec{E}|$ durch Raumwinkel-Integration umformen auf

(2.35) $$W(E) = \frac{2}{\pi} E \int_0^\infty K \cdot A(K) \sin(K \cdot E)\, dK .$$

Unter Einführung der reduzierten Feldstärke (analog zu Gleichung 2.14)

(2.36) $$\beta = \frac{E}{E_0}$$

und der Substitution

(2.37) $$X = K \cdot E_0$$

wird aus Gleichung 2.35:

(2.38) $$W(\beta) = \frac{2}{\pi}\beta \int_0^\infty x\, A(x) \sin(\beta x)\, dx$$

Nach Einsetzen der Fourier-Transformierten aus Gleichung 2.33 lautet die Holtsmarkverteilung schließlich

(2.39) $$H(\beta) = \frac{2}{\pi}\beta \int_0^\infty x\, e^{-x^{3/2}} \sin(\beta x)\, dx,$$

wobei die verbleibende Integration nicht in geschlossener Form

ausführbar ist. Der numerisch ermittelte Verlauf von H(ß) ist zusammen mit dem der "nearest-neighbour"-Verteilung nach Gleichung 2.15 in Abb. 2.1 dargestellt. Der Median berechnet sich zu $ß_{NEB,H} = 2{,}148$ und der Mittelwert zu $\langle ß_n \rangle = 3{,}411$, während alle höheren Momente divergieren.

Für $ß \ll 1$ bzw. $ß \gg 1$ gelten die folgenden Entwicklungen:

$$H(ß) = \frac{4}{3\pi} ß^2 \left[1 - \frac{\Gamma(\frac{1}{3})}{6} ß^2 + \frac{\Gamma(\frac{4}{3})}{120} ß^4 - \ldots\right] \approx 0{,}424\, ß^2 \left[1 - 0{,}466\, ß^2 + 0{,}123\, ß^4 - \ldots\right] \tag{2.40}$$

$$H(ß) = \frac{15}{8}\sqrt{\frac{2}{\pi}}\, ß^{-5/2} \left[1 + \frac{96}{15}\sqrt{\frac{2}{\pi}}\, ß^{-3/2} + \ldots\right] \approx 1{,}496\, ß^{-5/2} \left[1 + 5{,}106\, ß^{-3/2} + \ldots\right] \tag{2.41}$$

Beim Vergleich von Gleichung 2.41 mit der entsprechenden Entwicklung für die "nearest-neighbour"-Theorie (Gleichung 2.16) wird klar, daß die Holtsmark-Theorie für $ß \gg 1$ im wesentlichen den Einfluß des nächsten Nachbarteilchens wiedergibt. Dem entspricht, daß für beide Verteilungen nur das erste Moment endlich ist. Ein weiteres Anzeichen für die Ähnlichkeit beider Theorien gibt die praktisch gleiche Normalfeldstärke E_0, die in beiden Fällen durch den (vergleichsweise geringen) Abstand $n^{-1/3}$ charakterisiert ist.

2.2.2 Beschränkung auf endliche Teilchenzahlen N

Für die Computersimulationen bei endlichen Teilchenzahlen in endlichen Volumina interessiert die Holtsmarkverteilung in Abhängigkeit von der Teilchenzahl N. Deshalb wird das Integral in Gleichung 2.23 für $z_1 \ll 1$ (bei $z_0 \to \infty$) entwickelt. Wie in Anhang A genauer ausgeführt, ergibt sich für $N \gg 1$ nach dem Übergang zur Exponentialfunktion statt Gleichung 2.33 für die Fourier-Transformierte der Mikrofeldverteilung

$$A_N(x) = \exp\left(-x^{3/2}\left(1 - K_1 \frac{x^{1/2}}{N^{1/3}} + \frac{1}{2}\frac{x^{3/2}}{N}\right)\right) \tag{2.42}$$

mit

$$K_1 = \frac{1}{8}\left(\frac{25}{\pi}\right)^{2/3} \approx 0{,}498\,, \tag{2.43}$$

so daß die Feldverteilung für endliche Teilchenzahlen unter

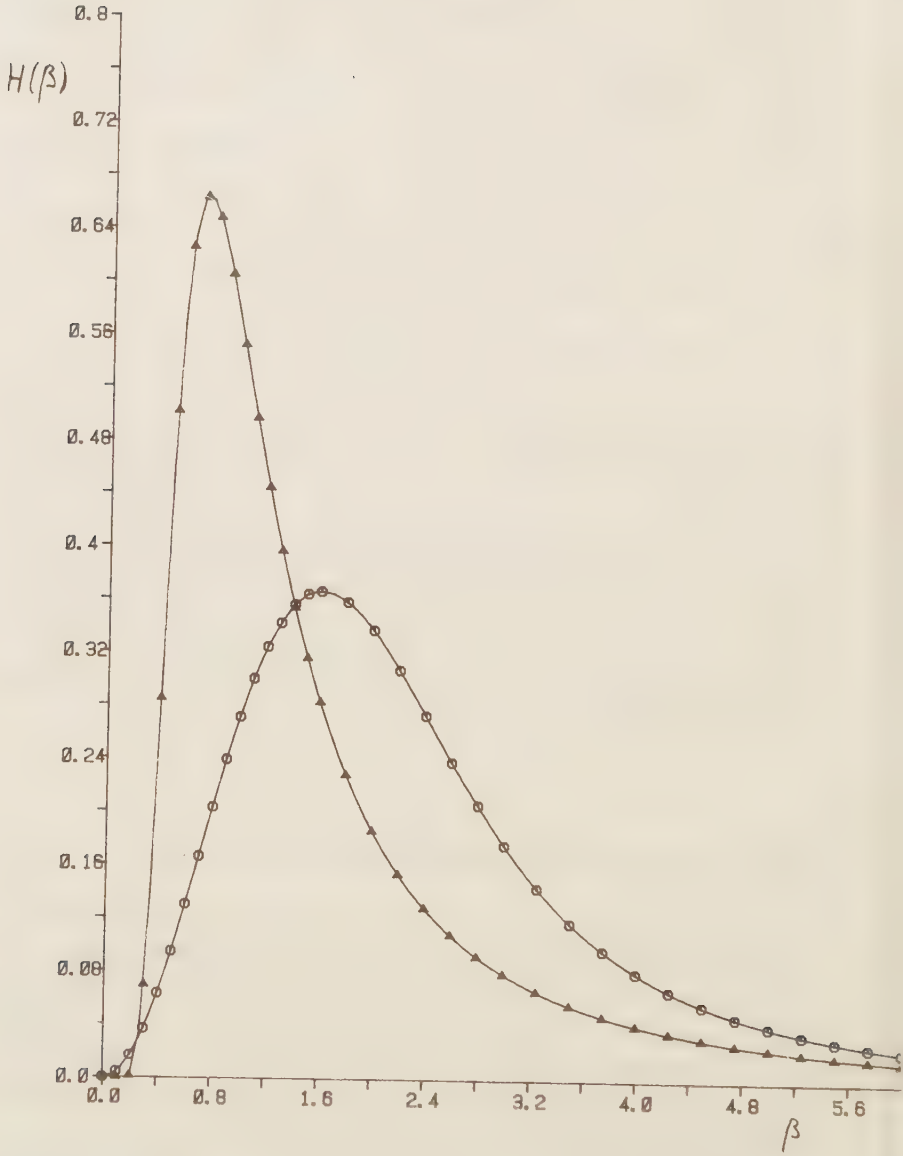


Abb. 2.1: Mikrofeldverteilung
nach der "nearest-neighbour"-Theorie (▲)
und nach der Holtsmark-Theorie (⊙)

Voraussetzung sphärischer Symmetrie lautet:

$$(2.44)\quad H_N(\beta) = \frac{2}{\pi}\beta \int_0^\infty x\, e^{-x^{3/2}\left(1-K_1\frac{x^{1/2}}{N^{1/3}}+\frac{1}{2}\frac{x^{3/2}}{N}\right)} \sin(\beta x)\, dx$$

In Abb. 2.2 ist der Verlauf von $H_N(\beta)$, gewonnen durch numerische Ausführung der Fourier-Transformation, für einige Teilchenzahlen N dargestellt. Die Kurven werden im Vergleich zur Holtsmark-Verteilung für endliche N steiler mit höheren Maxima.

Die Abbildung 2.3 zeigt die N-Abhängigkeit von Median und Mittelwert. Zusätzlich eingezeichnet ist die Näherung für Median und Mittelwert nach Kreitz /39/:

$$(2.45)\quad E_x(N) = E_x(\infty)\cdot\left(1-\frac{g}{3}N^{-1/3}\right)$$

(mit g = 1 für eine Kugel als Gesamtvolumen, siehe Abschnitt 3.1.3.1).

2.2.3 Beschränkung auf einen endlichen Feldstärkenbereich

Bei einem Vergleich der numerischen Experimente mit der Theorie muß berücksichtigt werden, daß Rechner nur Zahlen endlicher (Dual-) Stellenzahl verarbeiten. Außerdem kann sich bei der begrenzten Anzahl der Computerexperimente für die seltenen sehr hohen Feldstärken eine so geringe statistische Sicherheit ergeben, daß die Ausnutzung dieser Werte insbesondere für die höheren Momente nicht sinnvoll erscheint.

Deshalb werden im folgenden bei einigen Auswertungen die Momente einer "abgeschnittenen" Holtsmark-Verteilung gemäß

$$(2.46)\quad \langle\beta_a^\mu\rangle = \frac{1}{K_M}\int_0^{\beta_M}\beta^\mu H(\beta)\, d\beta \qquad (\mu = 0,1,\ldots)$$

benutzt, wobei der maximale Feldstärkenwert β_M empirisch auf $\beta_M = 8$ festgelegt wurde (näheres in Abschnitt 3.3.2). Wegen der notwendigen Normierung folgt für K_M aus Gleichung 2.46 mit $\mu = 0$:

$$(2.47)\quad K_M = \int_0^{\beta_M} H(\beta)\, d\beta$$

Die numerische Rechnung liefert für die Holtsmark-Verteilung und $\beta_M = 8$ den Wert $K_M = 0{,}951$, so daß nur ein geringer Unter-

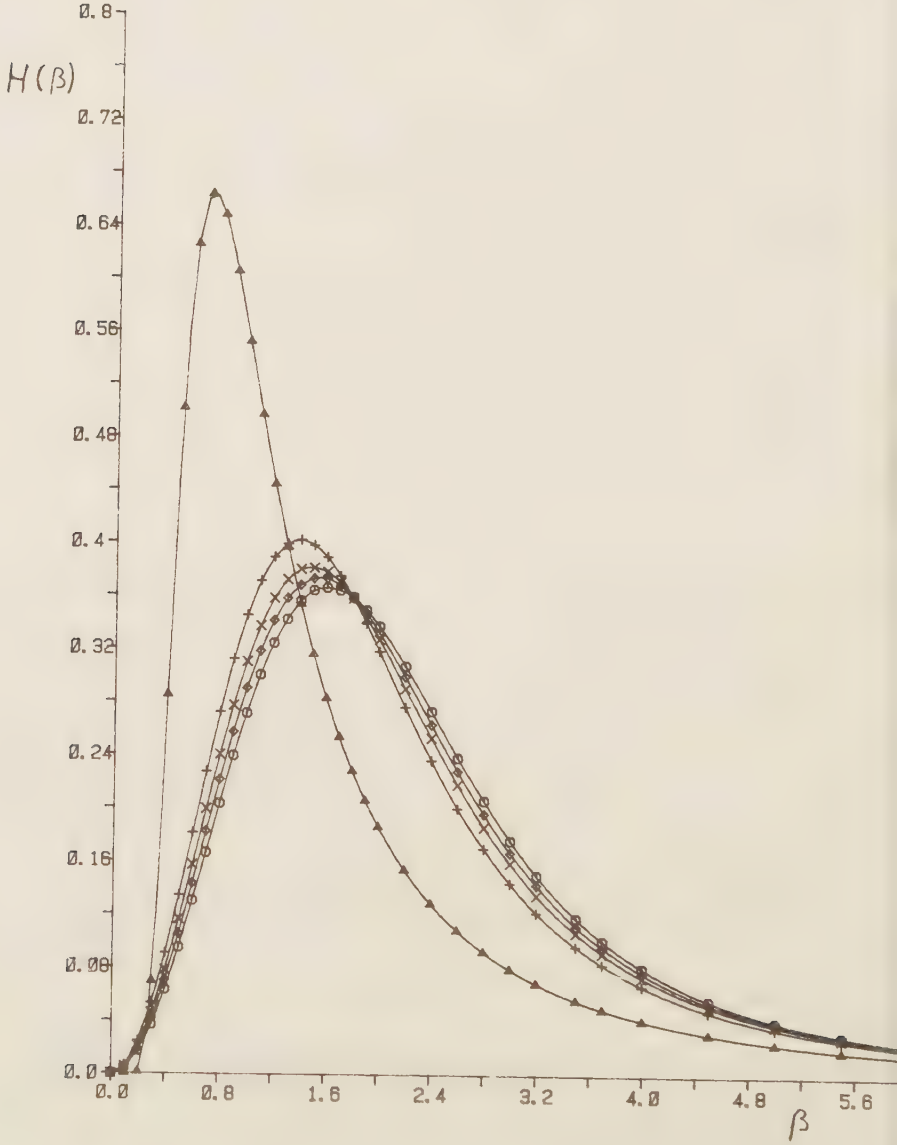


Abb. 2.2: Holtsmark-Verteilung für endliche Teilchenzahlen N für sphärische Symmetrie (berechnet durch numerische Fourier-Transformation von Gleichung 2.44)

\+ N= 32
× N= 256
◆ N=2048
⊙ Holtsmark-Verteilung (N=∞)
▲ "nearest-neighbour"-Verteilung

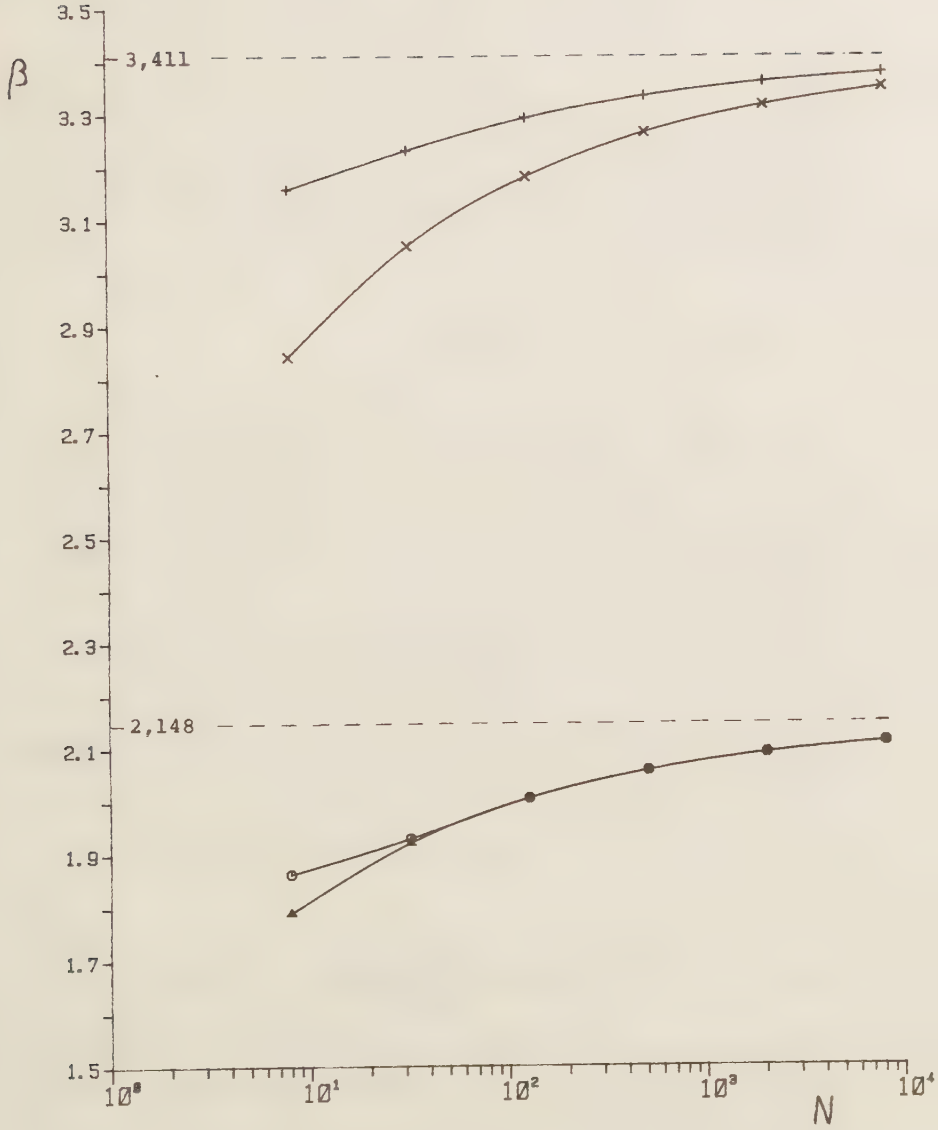


Abb. 2.3: Median und Mittelwert nach der Holtsmark-Theorie für endliche Teilchenzahlen $N \gg 1$
⊙ Median, berechnet nach Gleichung 2.44
▲ Median, berechnet nach Gleichung 2.45
\+ Mittelwert, berechnet nach Gleichung 2.44
× Mittelwert, berechnet nach Gleichung 2.45
Gestrichelt sind die Werte nach Holtsmark für $N \to \infty$.

schied gegenüber der vollständigen Verteilung auftritt. Aber alle nach Gleichung 2.46 berechneten Momente sind für $\mu > 0$ natürlich niedriger als die entsprechenden Momente der vollständigen Holtsmark-Verteilung und sind insbesondere für $\mu \geq 2$ endlich. Für die abgeschnittene Holtsmark-Verteilung ergeben sich Median und Mittelwert zu $\beta_{MED.A} = 2{,}071$ und $\langle \beta_A \rangle = 2{,}408$.

Auf dieselbe Weise sind auch alle übrigen theoretischen Verteilungen auf ein endliches Intervall umrechenbar.

2.3 Weitere "Nahfeld-Theorien"

Wie in der Einleitung erwähnt, benutzen alle bisher aufgestellten Theorien zum Mikrofeld - mit Ausnahme der von Hunger und Larenz (siehe Abschnitt 2.4) - ohne weiteres den problematischen Grenzübergang $R \to \infty$ und vernachlässigen dadurch das Fernfeld. Zudem zeigt sich numerisch, daß die Unterschiede zwischen den Ergebnissen dieser Theorien bei den hier betrachteten Plasmabedingungen (siehe Anhang C) nur wenige Prozent betragen. Deshalb sei stellvertretend für alle Holtsmark-ähnlichen Theorien nur kurz auf die Rechnung von Baranger und Mozer /45/ eingegangen. Sie betrachten nicht nur die Abschirmung der Teilchen untereinander, indem sie (in Übereinstimmung mit Ecker /13/) die Coulombfelder durch "Debye-Felder"

$$\vec{E}_D(\vec{r}) = \frac{e_0}{r^3}\,\vec{r}\left(1 + \frac{r}{\lambda_D^*}\right) e^{-\frac{r}{\lambda_D^*}} \tag{2.48}$$

mit der Debye-Länge

$$\lambda_D^* = \left\{ \frac{k_B T}{4\pi n_e e_0^2} \right\}^{1/2} \tag{2.49}$$

ersetzen, sondern auch die Korrelation zwischen den Teilchen durch Berücksichtigung der Paarverteilungsfunktion in Gleichung 2.6 durch den Ansatz

$$W(\vec{E}) = V^{-N} \int_{(3N)} \int \delta\left\{\vec{E} - \sum_{i=1}^{N} \vec{E}(\vec{r}_i)\right\} \left(1 + \sum_{\substack{i,j \\ i>j}}^{N} g_{ij}(\vec{r}_i, \vec{r}_j)\right) d\vec{r}_1 \ldots d\vec{r}_N \tag{2.50}$$

mit

(2.51) $$g_2(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \exp\left\{ \frac{e_0^2}{\gamma_B T} \frac{e^{-\frac{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}{\lambda_D}}}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|} \right\} - 1 \approx -\frac{e_0^2}{\gamma_B} \cdot \frac{e^{-\frac{r_1}{\lambda_D}} \frac{r_2}{\lambda_D}}{r_1 - r_2} .$$

Zusätzlich unterscheiden sie zwischen den Zeitskalen für Elektronen und Ionen, was zu einer hochfrequenten und einer niederfrequenten Komponente des Mikrofeldes führt. Für die hochfrequente Komponente wird keine Abschirmung angenommen, so daß dafür das unveränderte Coulomb-Feld maßgebend ist. Die aufgrund der Näherung in Gleichung 2.51 nur für $y < 1$ gültigen Rechnungen ergeben für die Fourier-Transformierte der Mikrofeld-Verteilung:

(2.52) $$A_{BM}(x) = e^{-x^{3/2}\left[\Psi_1(x^{1/2}y) - \Psi_2(x^{1/2}y)\right]}$$

mit

(2.53) $$y = \frac{r_0}{\lambda_D^*} = \left(\frac{15}{4}\right)^{1/3} \frac{1}{\alpha} \simeq \frac{1{,}554}{\alpha} < 1 ,$$

wobei auch hier der schon von Wilke /36/ angegebene charakteristische Plasmaparameter α (siehe Anhang C), definiert durch

(2.54) $$\alpha^2 = \frac{\gamma_B T}{e_0^2 n^{1/3}} ,$$

benutzt werden soll, und r_0 durch Gleichung 2.29 gegeben ist. Für die langsam veränderliche Komponente gilt

$$\Psi_{1L}(v) = \frac{15}{2\sqrt{2}\pi} \int \left[1 - j_0(W(\sigma,v))\right] \sigma^2 \, d\sigma$$

(2.55)
$$\Psi_{2L}(v) = \frac{15}{64\pi^3\sqrt{2\pi}} v^2 \int\int \left[e^{iW(\sigma,v)\cos\theta_1} - 1\right] \cdot \left[e^{iW(\sigma,v)\cos\theta_2} - 1\right] \frac{e^{-\sqrt{2}v|\vec{\sigma}_1 - \vec{\sigma}_2|}}{|\vec{\sigma}_1 - \vec{\sigma}_2|} \, d\vec{\sigma}_1 \, d\vec{\sigma}_2$$

mit $j_0(z)$ als sphärischer Besselfunktion nullter Ordnung /44/

(2.56) $$j_0(z) = \frac{\sin z}{z}$$

sowie

(2.57) $$W(\sigma,v) = \frac{1+v\sigma}{\sigma^2} e^{-v\sigma}$$

und für die schnell veränderliche Komponente

$$\Psi_{1S} \equiv 1$$

(2.58)
$$\Psi_{2S}(v) = \frac{15}{64\pi^3\sqrt{2\pi}} v^2 \int\int \left[e^{i\frac{\cos\theta_1}{\sigma_1}} - 1\right] \cdot \left[e^{i\frac{\cos\theta_2}{\sigma_2}} - 1\right] \frac{e^{-v|\vec{\sigma}_1 - \vec{\sigma}_2|}}{|\vec{\sigma}_1 - \vec{\sigma}_2|} \, d\vec{\sigma}_1 \, d\vec{\sigma}_2 .$$

Pfennig und Trefftz /46/ stellten später fest, daß die von Baranger und Mozer angegeben Tabellen einen numerischen Fehler enthalten. Daher werden im folgenden die korrigierten Werte nach Pfennig und Trefftz benutzt.

In Abb. 2.4 bzw. 2.5 ist die Verteilung der hoch- bzw. niederfrequenten Komponente nach Gleichung 2.58 bzw. 2.55 für einige Werte des Parameters α dargestellt. Das Maximum der Funktionen ist in Richtung auf die "nearest-neighbour"-Verteilung verschoben und erreicht höhere Werte als das Holtsmark-Maximum, d.h. der Einfluß des nächsten Nachbarteilchens bestimmt auch hier entscheidend den Verlauf der Verteilung, was insbesondere im für große Feldstärken gegenüber der Holtsmark-Verteilung unveränderten, zu $\beta^{-5/2}$ proportionalen Abfall zum Ausdruck kommt.

Für $\alpha^2 = 15$ ergeben sich Median und Mittelwert der abgeschnittenen Verteilungen (siehe Abschnitt 2.2.3) zu $\beta_{MED\ BML} = 1{,}632$ und $\langle\beta_{BML}\rangle = 2{,}039$ für die langsam veränderliche Komponente bzw. $\beta_{MED\ BMS} = 1{,}761$ und $\langle\beta_{BMS}\rangle = 2{,}142$ für die schnell veränderliche Komponente.

2.4 Fernfeldtheorie nach Hunger-Larenz

Im Unterschied zu allen vorhergehend beschriebenen Theorien, bei denen das mittlere Feldstärkenquadrat und damit die Energiedichte divergiert, berechnen Hunger und Larenz /20/ das Mikrofeld für eine mikrokanonische Gesamtheit mit konstanter, positiv-endlicher Gesamtenergie. Dabei bewirken die von vornherein als Maxwell-verteilt angenommenen Geschwindigkeiten eine endliche mittlere kinetische Energie und somit zwangsläufig auch eine endliche mittlere potentielle Energie, wodurch die Schwierigkeiten bei der Integration in Gleichung 2.2 vermieden werden. Bei diesem Vorgehen wird ausgeschlossen, daß Konfigurationen mit extrem negativer potentieller Energie auftreten, was nichts anderes bedeutet als eine nicht durchgängig gleich große Besetzungswahrscheinlichkeit für gleich große Bereiche auf der Energie-Hyperfläche im Phasenraum oder anders gesprochen eine kleine Abweichung vom ergodischen Verhalten des Systems. Wie Larenz ausführt /34/, ist diese Abweichung bei allen realen physikalischen Systemen schon aufgrund ihrer endlichen Lebensdauer gegeben, wenngleich bei den üblichen statistischen Rechnungen wegen der mathematisch einfacheren Behandlung durchweg Ergodizität vorausgesetzt wird.

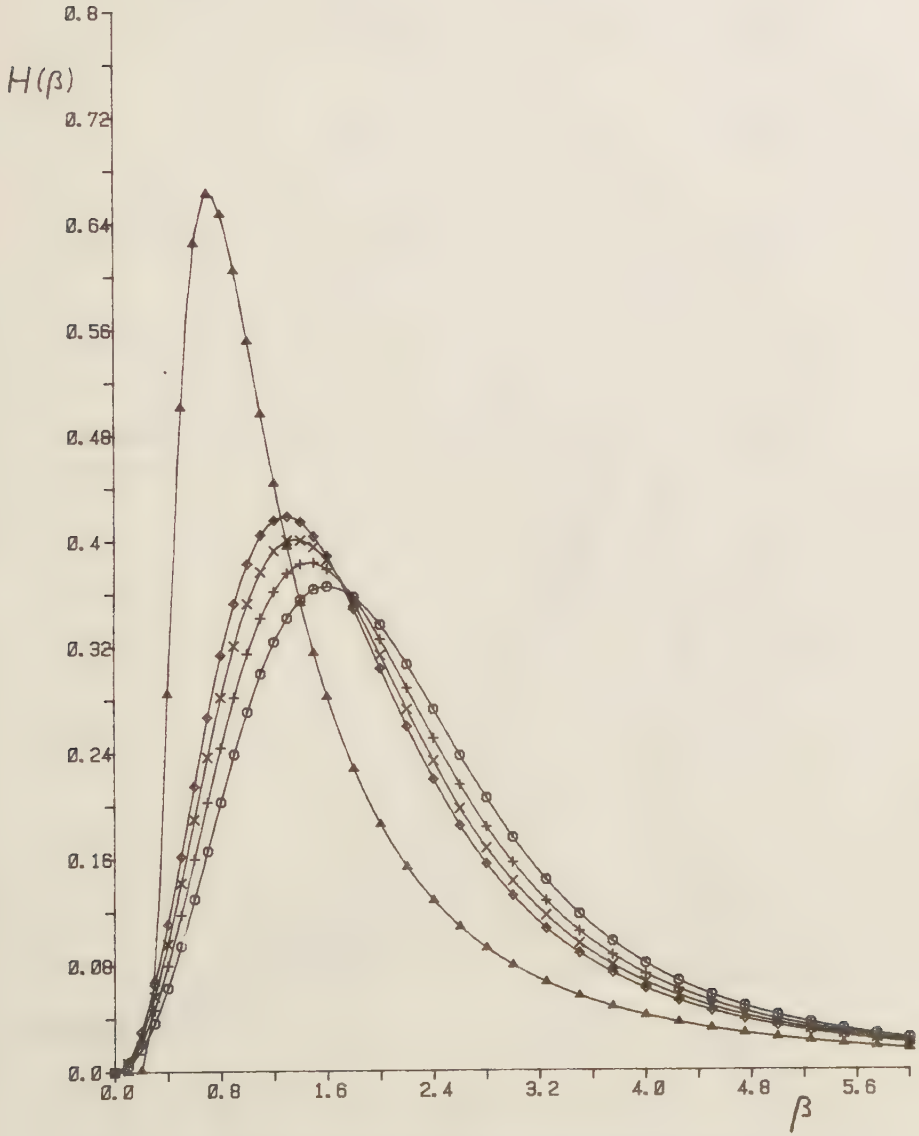


Abb. 2.4: Hochfrequente Komponente der Mikrofeldverteilung nach Baranger und Mozer (num. Werte nach Pfennig und Trefftz, α^2 = Plasmaparam. nach Gl. 2.54)

\+ α^2=60
× α^2=15
◆ α^2= 6,7
◎ Holtsmark-Verteilung
▲ "nearest-neighbour"-Verteilung

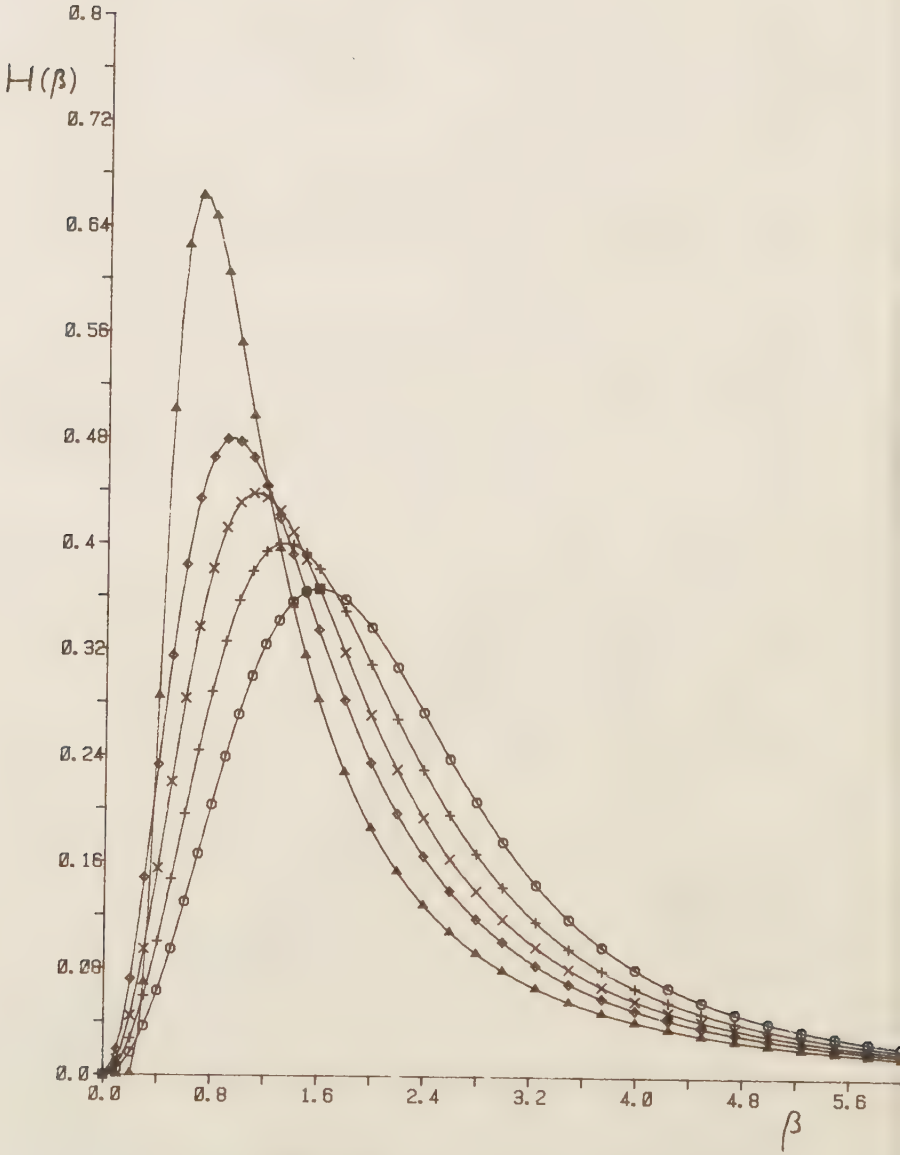


Abb. 2.5: Niederfrequente Komponente der Mikrofeldverteilung nach Baranger und Mozer (num. Werte nach Pfennig und Trefftz, α^2 = Plasmaparam. nach Gl. 2.54)

\+ α^2=60
× α^2=15
◆ α^2= 6,7
o Holtsmark-Verteilung
▲ "nearest-neighbour"-Verteilung

Es sei zunächst von der Energiebetrachtung ausgegangen, indem die Gesamtenergie $N \cdot \varepsilon$ der N Teilchen in bekannter Weise geschrieben wird als Summe aus kinetischer und potentieller Energie:

$$N \cdot \varepsilon = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N} \frac{\vec{p}_j^{\,2}}{m_j} + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{N} \frac{e_j e_i}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} \tag{2.59}$$

Im Gleichgewicht gilt die für den Impuls $\vec{p} = m \cdot \vec{v}$ geschriebene Maxwellsche Geschwindigkeitsverteilung

$$f_M(\vec{p}) = \frac{4}{\sqrt{2\pi}} \left\{ 2\pi m k_B T \right\}^{-3/2} \cdot \vec{p}^{\,2} \cdot e^{-\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m k_B T}} \tag{2.60}$$

mit der Temperatur T gemäß

$$\frac{3}{2} k_B T = \frac{\langle \vec{p}^{\,2} \rangle}{2m} \tag{2.61}$$

Die allgemeine statistische Gewichtsfunktion $\tilde{F}$ in Gleichung 2.5 schreibt sich dann

$$\tilde{F}(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N) = \delta \left(2N\varepsilon - \sum_{j=1}^{N} \frac{\vec{p}_j^{\,2}}{m_j} - \sum_{j=1}^{N} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{N} \frac{e_j e_i}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} \right) f_M(\vec{p}_1) \ldots f_M(\vec{p}_N) \tag{2.62}$$

und damit wird aus dem allgemeinen Ansatz (Gleichung 2.4) die Wahrscheinlichkeitsverteilung für das Auftreten der Feldstärkenkomponente E_x und der System-Energie $N \cdot \varepsilon$ zu

$$W(E_x, \varepsilon) = \frac{1}{V^N} \int^{(6N)} \int \delta \left(E_x - \sum_{j=1}^{N} E_{xj} \right) \delta \left(2N\varepsilon - \sum_{j=1}^{N} \frac{\vec{p}_j^{\,2}}{m_j} - \sum_{j=1}^{N} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{N} \frac{e_j e_i}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} \right) \cdot$$

$$\cdot f_M(\vec{p}_1) \ldots f_M(\vec{p}_N)\, d\vec{r}_1 \ldots d\vec{r}_N\, d\vec{p}_1 \ldots d\vec{p}_N \,. \tag{2.63}$$

Nach /20/ wird in ähnlicher Weise vorgegangen wie in Abschnitt 2.2.1 (Übergang zur Fourier-Transformierten und Ausführung der $\vec{p}$-Integration). Dann zeigt sich, daß der Ausdruck 2.63 in zwei Faktoren aufgespalten werden kann, von denen einer, nämlich

$$W(\varepsilon) = \sqrt{\frac{N}{6\pi}} \cdot \frac{1}{k_B T} \, e^{-\frac{N \left(\frac{3}{2} k_B T - \varepsilon \right)^2}{6 (k_B T)^2}} \,, \tag{2.64}$$

die Wahrscheinlichkeit $W(\varepsilon) \cdot d\varepsilon$ darstellt, daß ein Teilchen im Mittel die Energie ε in der Umgebung von $\frac{3}{2} k_B T$ besitzt, und für $N \to \infty$ zur δ-Funktion im Sinne der mikrokanonischen Gesamtheit wird. Der zweite Faktor enthält im Integranden noch eine Funktion der Teilchenabstände untereinander; er verhindert insbesondere, daß sich zwei oder mehr Teilchen gleichzeitig am gleichen Ort aufhalten können, was zur Divergenz der poten-

tiellen Energie führen würde. Nach der Integration über die Ortskoordinaten ergibt sich die Mikrofeldverteilung schließlich als Gaußverteilung bzw. Gauß-Maxwell-Verteilung:

$$(2.65)\quad W(E_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{E_{0_{HL}}} e^{-\left[\frac{E_x}{E_{0_{HL}}}\right]^2} \quad \text{bzw.} \quad W(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{E^2}{E_{0_{HL}}^3} e^{-\left[\frac{E}{E_{0_{HL}}}\right]^2}$$

mit

$$(2.66)\quad E_{0_{HL}}^2 = 8\pi n K_B T \qquad \text{und} \qquad \langle \vec{E}^2 \rangle = 12\pi n K_B T \ ,$$

also mit endlicher Energiedichte.

Auf den Zusammenhang mit der Nyquist-Formel und der Debye-Länge /16/ wurde schon in der Einleitung hingewiesen. Weitere von Hunger und Larenz in diesem Zusammenhang behandelte Fragen zur Mikrofeld-Autokorrelationsfunktion werden in Abschnitt 4.1 diskutiert.

In einer weiteren Arbeit /24/ betrachten dieselben Autoren den Übergang vom Holtsmarkschen zum Gaußschen Verhalten der Mikrofeldverteilung genauer. Zunächst wird erläutert, wie die bereits erwähnten Schwierigkeiten beim Grenzübergang $N \to \infty$ in der Holtsmarkschen Theorie (und in allen damit verwandten Theorien) zustande kommen. Ausgehend von Gleichung 2.18, der Fourier-Transformierten, wird am Beispiel für eines der N Teilchen die Reihenfolge der bisher immer als problemlos angesehenen Raumwinkelintegration, die bei Holtsmark zuerst ausgeführt wurde, und der radialen Integration vertauscht, wobei vorsichtshalber die untere Integrationsgrenze etwa des Polarwinkels θ zunächst auf $\theta_j \neq 0$ gesetzt wird:

$$(2.67)\quad A_j(K) = \frac{2\pi}{V} \int_{\cdot}^{\infty} \int_{\theta_j}^{\pi} e^{i \frac{K e_j}{r^2} \cos\theta} \, r^2 \sin\theta \, d\theta \, dr$$

Die radiale Integration liefert näherungsweise (bis auf Glieder der Ordnung R^{-4}):

$$(2.68)\quad A_j(K) \to \frac{1}{2} \int_{\theta_j}^{\pi} \Big[1 - \frac{1}{R^3} \Big[-3 i K e_j R \cos\theta + \sqrt{2\pi}\, K^{3/2} |e_j \cos\theta|^{3/2} \big[1 + i\, \mathrm{sgn}(e_j \cos\theta) \big] \Big] \Big] \sin\theta \, d\theta$$

Nach der jetzt folgenden Winkelintegration treten beim ersten Term in der eckigen Klammer Probleme auf,

$$(2.69)\quad A_j(K) \to 1 - \frac{1}{R^3} \Big[\frac{3}{4} i K e_j R \theta_j^2 + \frac{2}{5} \sqrt{2\pi}\, K^{3/2} |e_j|^{3/2} \Big] ,$$

weil das Produkt $R \theta_j^2$ (entstanden durch Entwicklung von $\sin^2 \theta_j$

für kleines θ_j) für $R \to \infty$ und $\theta_j \sim R^{-\gamma_j/2} \to 0$ $(0 < \gamma_j < 1)$ unbestimmt wird und als gegebenenfalls beliebig groß werdender Fernfeldanteil gedeutet werden kann. Der durch die Begrenzung der θ-Integration auf den Bereich von $\theta_j > 0$ bis π dem Ladungsträger e_j zunächst nicht zugängliche Volumenbereich ist

$$(2.70) \qquad \frac{\Delta V_j}{V} = \frac{1}{2} \int_0^{\theta_j} \sin\theta \, d\theta \simeq \frac{\theta_j^2}{4} \sim R^{-\gamma_j}$$

und geht dabei also für $R \to \infty$ gegen Null. Aus Gleichung 2.69 ist weiterhin zu ersehen, daß der zweite Term (proportional zu $k^{3/2}$) zur Holtsmarkschen Fourier-Transformierten führt, während der erste Term, der wieder allgemein und mit dem Vorfaktor R^{-3} in der Form $-\frac{i}{R^3}\,(\,3 \cdot i \cdot k\, e_j\, R \langle \cos\theta_j \rangle\,)$ geschrieben wird, als Beitrag des j-ten Teilchen zur Dipolmomentdichte $\sum_{j=1}^{N\to\infty} \frac{e_j \vec{r}_j}{R^3}$ aufgefaßt werden kann. Hunger und Larenz /24/ zeigen - im Vorgriff auf noch zu diskutierende Ergebnisse - nämlich, daß Fernfeld und Dipolmomentdichte miteinander verknüpft sind.

Um den oben gezeigten kritischen Grenzübergang zu vermeiden, benutzen Hunger und Larenz /24, 40/ eine Ordnung der Plasmateilchen nach ihren mittleren Abständen vom Aufpunkt und betrachten deren Permutationen. So ergibt sich für die Mikrofeldverteilung unter Benutzung der Abstandsverteilungen für den jeweiligen Teilchenabstand r_j $(\frac{4\pi}{3} r_j^3 = V_j)$ der Ansatz

$$(2.71) \qquad W(\vec{E}) = \int_{(N)} \cdots \int \delta\left(\vec{E} - \sum_{j=1}^{N} \frac{e_j \vec{r}_j}{r_j^3}\right) \prod_{j=1}^{N\to\infty} \left(\frac{(n V_j)^{j-1}}{(j-1)!}\, e^{-n V_j}\, n\, dV_j \right),$$

der zum Holtsmarkschen Ansatz zurückführt, wenn die Permutation vorweg ausgeführt wird. Zunächst berechnet sich für das dem Aufpunkt nächste Teilchen (j = 1) die Fourier-Transformierte zu

$$(2.72) \qquad A_1(K) = 1 - \frac{16}{15}\,\pi\,\sqrt{\frac{\pi}{2}}\, n \langle |e_1|^{3/2} \rangle K^{3/2} + \left(\frac{4\pi}{3} n\right)^{4/3} \Gamma\left(\frac{2}{3}\right) \frac{\langle e_1^2 \rangle}{2} K^2,$$

wobei der zu $k^{3/2}$ proportionale Term vom bekannten Holtsmarkschen Charakter ist. Für die restlichen N-1 Faktoren in Gleichung 2.71 liefert die Rechnung nach /24/:

$$(2.73) \qquad \prod_{j=2}^{N\to\infty} A_j(K) = \int_{(N-1)} \int \Bigg[1 + iK \sum_{j=2}^{N} \frac{e_j \cos\theta_j}{r_j^2} - \frac{K^2}{2} \sum_{j=2}^{N} \frac{e_j \cos^2\theta_j}{r_j^4} - \frac{K^2}{2} \sum_{j=2}^{N} \sum_{\substack{l=2 \\ l\neq j}}^{N} \frac{e_j e_l}{r_j^2 r_l^2} \cos\theta_j \cdot \cos\theta_l + \ldots \Bigg] \prod_{j=2}^{N} \left(\frac{(n V_j)^{j-1}}{(j-1)!}\, e^{-n V_j}\, n\, dV_j \right)$$

Im dritten Term in der eckigen Klammer ("Korrelationsterm") kann die Gruppierung von Ladungsträgern zu Raumladungen (siehe

auch /17/) zum Ausdruck kommen. Bei der räumlichen Integration wird ein Ausschließungsvolumen δV berücksichtigt, durch das der gleichzeitige Aufenthalt mehrerer Teilchen am gleichen Ort verhindert wird. Ist damit einerseits der Anschluß an die obige Diskussion über Nichtergodizität hergestellt, so kann andererseits das Ausschließungsvolumen durch Wechselwirkung oder auch durch Schwankungen erklärt werden. Es ergibt sich nach /24/

$$(2.74)\quad \prod_{j=2}^{N\to\infty} A_j(K) \approx 1 - \frac{K^2}{2} \langle e_0^2 \rangle \left(\frac{4\pi}{3} n\right)^{4/3} \Gamma\left(\frac{2}{3}\right)\left(1 + 0{,}613\, n\, \delta V\right) .$$

Wie bei der ursprünglichen Holtsmark-Theorie in Abschnitt 2.2.1 führen die Gleichungen 2.72 und 2.74 beim Grenzübergang $N \longrightarrow \infty$ zu einer Exponentialfunktion für die Fourier-Transformierte:

$$(2.75)\quad A_{HL}(K) = e^{-\frac{16}{15}\pi\sqrt{\frac{\pi}{2}}\langle |e_0|^{3/2}\rangle n K^{3/2} - \langle e_0^2\rangle \left(\frac{4\pi}{3} n\right)^{4/3} \cdot 0{,}415\, n\, \delta V\, K^2}$$

Die Feldverteilung ist daher, wie in der Einleitung schon angedeutet, die Faltung einer Holtsmark- mit einer Gauß-Verteilung, wobei erstere durch die dem Aufpunkt nächste Ladung zustande kommt und letztere aufgrund des nach Gleichung 2.69 als schwankend zu interpretierenden Fernfeldanteils eine Verbreiterung dieser Holtsmark-Verteilung bewirkt. Dabei stellt der Ausdruck

$$(2.76)\qquad \langle e_0^2 \rangle \left(\frac{4\pi}{3} n\right)^{4/3} \cdot 0{,}415 \cdot n \cdot \delta V$$

in für Gaußverteilungen bekannter Weise 1/6 des schon in Gleichung 2.66 angegeben mittleren Fernfeldquadrats dar /20/; $\langle e_0 \rangle$ $n \cdot \delta V$ ist als charakteristisches Ladungsquadrat zu interpretieren, auch im Sinne der Raumladungsbetrachtungen nach /17/, und $n \cdot \delta V$ bedeutet eine charakteristische Teilchenzahl etwa in der Größenordnung der Anzahl der Ladungsträger in der Debye-Sphäre, womit die Abhängigkeit von den Plasmaparametern und damit von der Temperatur qualitativ zu verstehen ist. Wird das Feld auf die Holtsmarksche Normalfeldstärke E_0 (Gleichung 2.28) mit $x = k \cdot E_0$ (Gleichung 2.37) normiert, dann ergibt sich aus Gleichung 2.75:

$$(2.77)\qquad A_{HL}(x) = e^{-x^{3/2} - \frac{0{,}415}{4}\left(\frac{25}{\pi}\right)^{2/3} n\, \delta V x^2}$$

Die Zahl $n \cdot \delta V$ kann über den oben angegebenen Zusammenhang mit

dem mittleren Fernfeldquadrat als Verhältnis des mittleren Teilchenabstands zur Landau-Länge $l_L = \frac{e_o^2}{k_B T}$ aufgefaßt werden, wobei dieses Verhältnis auch wiederum durch den Parameter α^2 nach Gleichung 2.54 darstellbar ist:

(2.78) $$n\delta V = \frac{3}{2}\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/3} \frac{1}{0{,}415} \frac{n^{-1/3}}{\frac{e_o^2}{k_B T}} = \frac{3}{2}\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/3} \frac{1}{0{,}415}\,\alpha^2$$

Zum Zweck der numerischen Fourier-Transformation wird damit aus Gleichung 2.77:

(2.79) $$A_{HL}(x) = e^{-x^{3/2} - \frac{15}{8\pi}\left(\frac{15}{4}\right)^{1/3}\alpha^2 x^2}$$

Für einige Werte des Plasmaparameters α sind die aus dieser Gleichung numerisch gewonnenen Mikrofeldverteilungen in Abb. 2.6 dargestellt. Im Unterschied zur Holtsmark-Verteilung und zu den durch geringfügige Korrekturen daraus entstandenen Verteilungen beispielsweise nach Abb. 2.4 fällt das verbreiterte und zu höheren Werten von ß verschobene Maximum auf, worauf bereits hingewiesen wurde.

Um die schon erwähnten, durch lokale Teilchenzahldichteschwankungen hervorgerufenen Raumladungen näher zu untersuchen, betrachten Hunger und Larenz /24/, auch im Hinblick auf die noch zu diskutierenden Computersimulationen, die Ladungsverteilung in einem aus N Teilchen bestehenden insgesamt neutralen Plasma ohne Wechselwirkung, welches in das Volumen $V = \frac{4\pi}{3} R^3$ eingeschlossen ist. In kleineren Volumenbereichen $V_p = \frac{4\pi}{3} R_p^3$ treten Schwankungen ΔN_p der Teilchenzahl N_p um den Mittelwert

(2.80) $$\langle N_p \rangle = \frac{V_p}{V} N$$

mit

(2.81) $$\langle \Delta N_p^2 \rangle = \langle N_p \rangle \left(1 - \frac{\langle N_p \rangle}{N}\right)$$

auf, wobei dem mittleren Teilchenzahl-Schwankungsquadrat $\langle \Delta N_p^2 \rangle$ ein mittleres Ladungsquadrat aus

(2.82) $$Q_p = e_o\left(\Delta N_{p+} - \Delta N_{p-}\right)$$

mit

(2.83) $$\langle Q_p^2 \rangle = e_o^2 \left\{ \langle \Delta N_{p+}^2 \rangle + \langle \Delta N_{p-}^2 \rangle \right\} = e_o^2 \langle N_p \rangle$$

und natürlich verschwindendem Mittelwert von Q_p,

(2.84) $$\langle Q_p \rangle = 0,$$

entspricht. Weitere Überlegungen bezüglich der Wahrscheinlichkeit, das Volumen V in dichtliegende, sich nicht überdeckende Teilvolumina V_p zu unterteilen, führen dann nach /24/

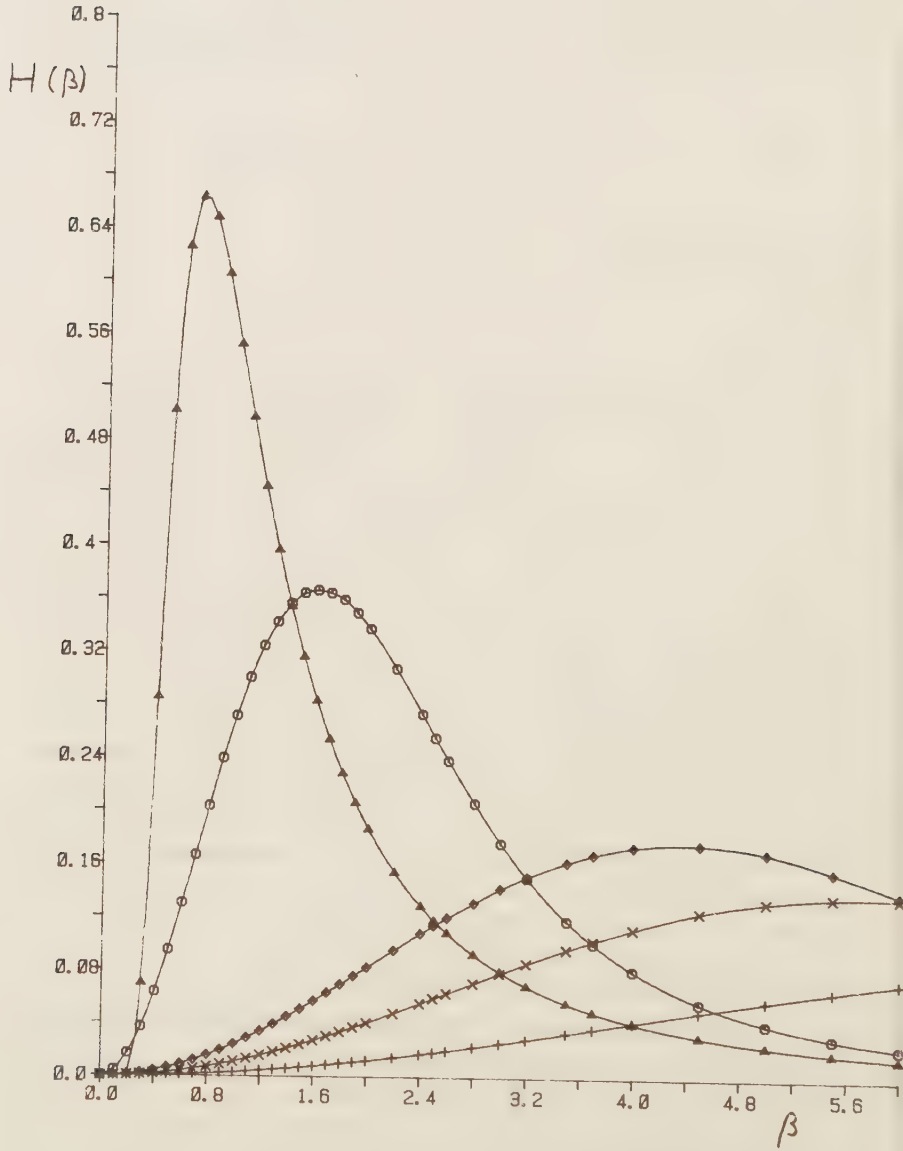


Abb. 2.6: Mikrofeldverteilung nach Hunger und Larenz
(α^2= Plasmaparameter nach Gleichung 2.54)

\+ α^2=10
× α^2= 4
◆ α^2= 2
⊙ Holtsmark-Verteilung
▲ "nearest-neighbour"-Verteilung

unter der Annahme einer in V_p homogen verteilten Ladung Q_p zu dem von diesen Ladungen am Aufpunkt im Kugelzentrum hervorgerufenen mittleren Feldstärkenquadrat des Fernfeldes für den hier betrachteten Fall ohne Wechselwirkung

(2.85) $$\langle E_k^2 \rangle \simeq e_o^2 \left(\frac{4\pi}{3} n\right)^{4/3} \cdot \frac{18}{5} \cdot 0{,}20 \cdot N^{1/6}$$

(der Index k steht für das von einem Ladungskollektiv stammende Fernfeld) oder wie oben normiert auf die Holtsmarksche Normalfeldstärke E_o:

(2.86) $$\langle \beta_k^2 \rangle \simeq \frac{9}{2} \left(\frac{5}{3\pi^2}\right)^{1/3} \cdot 0{,}20 \cdot N^{1/6} \approx 0{,}717\, N^{1/6}$$

Eine ähnliche Rechnung liefert nach /24/ für das mittlere Dipolmomentdichtenquadrat $\langle \vec{m}_k^{\,2} \rangle$ der betrachteten Raumladungsverteilung einen analogen Ausdruck, der zunächst nur für den wechselwirkungsfreien Fall gilt. Für sphärische Geometrie gilt als Zusammenhang mit dem mittleren Fernfeldquadrat

(2.87) $$\langle E_k^2 \rangle \simeq 6{,}7 \langle \vec{m}_k^2 \rangle .$$

Abschließend wird von Hunger und Larenz /24/ noch der relative Anteil der Ladungsträger bestimmt, der durch Aufbau von Raumladungen zum Fernfeld beiträgt und damit evtl. als Maß für die Abweichung vom ergodischen Verhalten dienen kann. Es gilt:

(2.88) $$\left(\frac{\Delta N}{N}\right)^2 = \frac{1}{e_o^2 N^2} \sum_{p=1}^{\nu} n_p \langle Q_p^2 \rangle \simeq \frac{1}{N}$$

Mit wachsendem N wird dieser Anteil zwar immer geringer, aber durch das weiter vorn dargestellte ungleichmäßige Konvergenzverhalten für R bzw. $N \sim R^3 \to \infty$ bleibt trotzdem ein Fernfeldeffekt übrig, der gemäß Gleichung 2.86 mit der zwölften Wurzel aus N ansteigt.

2.5 Auswirkungen eines geladenen Aufpunkts

Die Kenntnis des Mikrofeldes an einem geladenen Aufpunkt ist nicht nur von theoretischem Interesse, sondern sie ist auch nötig, um beispielsweise bei den Experimenten zur Laserfusion, wo dem Deuteriumplasma Argon zugemischt wird, über die Linienverbreiterung des Testions Argon Temperatur und Dichte des Plasmas zu bestimmen.

Nach der Theorie von Hunger und Larenz /24/ gelten die in Abschnitt 2.4 angegebenen Verteilungsfunktionen insbesondere für Plasmabedingungen $\alpha^2 \gg 1$ auch am Ort eines geladenen Teil-

chens, weil die Anwesenheit eines einzelnen Ladungsträgers am Aufpunkt die Bewegungen einer großen Zahl von anderen, den Fernfeldbeitrag liefernden Ladungsträgern in der weiteren Umgebung kaum beeinflußt.

Andere Rechnungen zum Mikrofeld an einem geladenen Aufpunkt sind ohne Berücksichtigung des Fernfeldes u.a. von Baranger und Mozer /45/ sowie von Hooper /14/ angegeben worden. (Differenzen zwischen diesen Theorien lassen sich wie schon in Abschnitt 2.3 erwähnt auch hier im wesentlichen auf eine inkorrekte numerische Auswertung in der erstgenannten Arbeit zurückführen.) Da die von diesen Autoren angegebenen analytischen Ausdrücke eine unübersichtliche Form besitzen, sei hier die entsprechende Mikrofeldverteilung nur graphisch wiedergegeben. In Abb. 2.7 ist der niederfrequente Anteil der Feldstärkenverteilung an einem Ion nach Hooper /14/ für $\alpha^2 = 15$ im Vergleich mit der Verteilung, welche nach dem gleichen Autor für einen neutralen Aufpunkt gilt, dargestellt.

Der Unterschied zum neutralen Aufpunkt ist zwar gering, so daß diese Theorien die obige Aussage von Hunger und Larenz ebenfalls bestätigen, aber es zeigt sich, daß das Maximum der Verteilung im Vergleich zur Holtsmark-Verteilung etwas höher liegt und zu etwas kleineren Werten von ß verschoben ist, was wieder den deutlichen Einfluß des nächsten Nachbarn allein ausdrückt. Die Abhängigkeit vom Parameter α^2 ist ähnlich wie bei einem neutralen Aufpunkt, daher sei auf eine der Abb. 2.5 analoge Darstellung verzichtet.

Median und Mittelwert der nach Abschnitt 2.2.3 abgeschnittenen Verteilung berechnen sich für $\alpha^2 = 15$ zu $ß_{MED,BMI} = 1{,}588$ und $\langle ß_{BMI} \rangle = 1{,}982$. Baranger und Mozer /45/ geben das nach ihrer Theorie für einen geladenen Aufpunkt endliche zweite Moment der niederfrequenten Mikrofeldverteilung näherungsweise zu

(2.89) $$\langle ß^2_{BMI} \rangle \simeq 8{,}94 \cdot y^{-2} \simeq 3{,}70\,\alpha^2$$

an. Jedoch gewinnt die Baranger-Mozer-Verteilung dadurch keineswegs Gaußcharakter. Denn für eine Gaußverteilung mit einem zweiten Moment gemäß Gleichung 2.89 müßte $\langle ß \rangle = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{2}{3}} \sqrt{3{,}70}\,\alpha$ gelten, also insbesondere die Proportionalität zu α, während, wie man z.B. der Abb. 2.7 in Verbindung mit Abb. 2.5 entnimmt, $\langle ß_{BMI} \rangle$ nur schwach, nämlich über Korrekturterme der Form $1 - f(\alpha)$ von α abhängt.

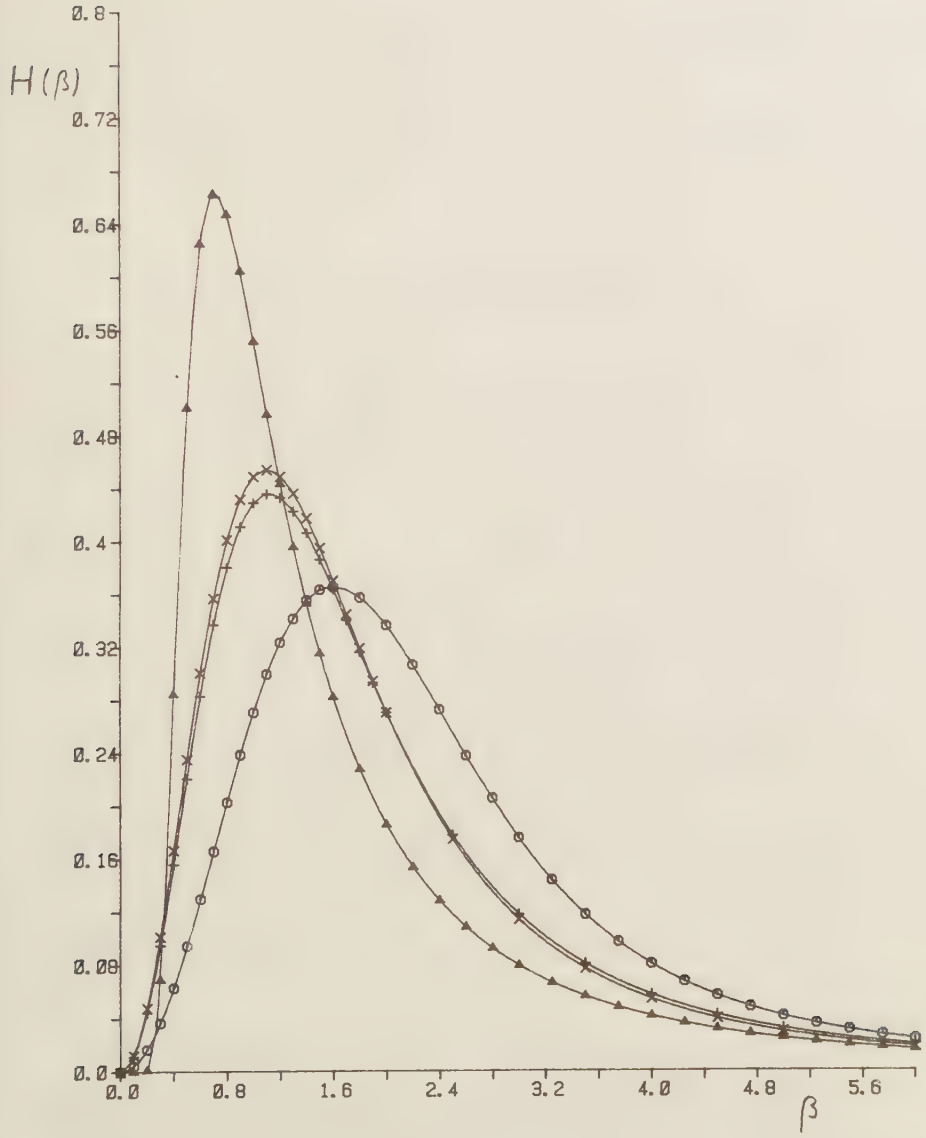


Abb. 2.7: Niederfrequente Komponente der Mikrofeld-verteilung nach Hooper für α^2=15
(α^2 = Plasmaparameter nach Gleichung 2.54)

\+ an einem neutralen Aufpunkt
× am Ort eines Ions
ø Holtsmark-Verteilung
▲ "nearest-neighbour"-Verteilung

Kapitel 3

Computersimulationen zum Mikrofeld

3.1 Monte-Carlo-Simulation

Vor dreißig Jahren benutzten Metropolis et al. /47/ zum ersten Mal das Monte-Carlo-Verfahren, um Probleme der statistischen Mechanik auf dem Computer zu simulieren. Seitdem hat dieses Verfahren Einzug in viele Bereiche der statistischen Physik gehalten (siehe z.B. die Zusammenstellung von Binder aus dem Jahre 1979 /48/). Im Jahr 1960 wendet Koller /29/ die Monte-Carlo-Methode an, um erstmals Mikrofelder im Plasma zu simulieren. Später verfeinert Wilke /36/ die von Koller angegebenen Verfahren, und 1975 berechnet Kreitz /39/ Mikrofelder für Plasma-Konfigurationen mit bis zu 10^6 Teilchen. Unabhängig davon simulieren Bailey /49/ in 50000 Computer-Experimenten Plasma-Mikrofelder mit 32, 64 und 128 Teilchen sowie Gervat und Rossignol-Guzzi /50/ Mikrofelder für $\alpha^2 \ll 1$ mit 64 Teilchen.

Wie sich bei Kreitz zeigte und auch aus Gleichung 2.86 hervorgeht, gewinnt erst bei sehr hohen Teilchenzahlen (ab etwa 10^6) der Gaußsche Charakter des Mikrofeldes im Sinne der Hunger-Larenz-Theorie (siehe Abschnitt 2.4) langsam an Einfluß gegenüber dem durch die nächsten Nachbarn hervorgerufenen Feld. Daher scheint es sinnvoll, diese Versuche unter Ausnutzung der inzwischen leistungsfähiger gewordenen Großrechner und durch optimierte Algorithmen für noch höhere Teilchenzahlen bei außerdem verbesserter statistischer Genauigkeit

weiterzuführen.

Durch das bei der Monte-Carlo-Methode nur lineare Anwachsen der Rechenzeit mit der Teilchenzahl konnte die Teilchenzahlabhängigkeit des Mikrofeldes verglichen mit Kreitz für bis zum Faktor 100 höhere Teilchenzahlen (das ist fast ein Faktor 5 in jeder Raumdimension) und für etwa zwanzigfach höhere Experimentzahlen untersucht werden.

3.1.1 Beschreibung des Verfahrens

Für jedes Experiment werden zunächst mit dem im Anhang D beschriebenen Pseudozufallszahlengenerator die gemäß Anhang C normierten Ortskoordinaten $\hat{\vec{r}}_i$ (i = 1, ..., N) von N Teilchen in einem um den Ursprung zentrierten Einheitswürfel bestimmt. Die eine Hälfte der Teilchen (i = 1, ..., N/2) ist positiv, die andere Hälfte (i = N/2 + 1, .., N) negativ geladen. Dann wird das elektrische Feld $\vec{E}$ im Ursprung

(3.1) $$\vec{E} = e_0 \left(\sum_{i=1}^{\frac{N}{2}} \frac{\vec{r}_i}{r_i^3} - \sum_{i=\frac{N}{2}+1}^{N} \frac{\vec{r}_i}{r_i^3} \right)$$

berechnet; zusätzlich werden die Felder $\vec{E}_{NN1}$ und $\vec{E}_{NN2}$ des dem Ursprung nächsten und zweitnächsten Nachbarn bestimmt, für die

(3.2) $$|\vec{E}_{NN1}| = \max_{i=1,\ldots,N} \left(|\vec{E}_i| \right)$$

(3.3) $$|\vec{E}_{NN2}| = \max_{\substack{i=1\ldots,N \\ i \neq i_{NN1}}} \left(|\vec{E}_i| \right)$$

mit

(3.4) $$\vec{E}_i = e_i \frac{\vec{r}_i}{r_i^3}$$

gilt. Die neun kartesischen Komponenten dieser Felder sowie die Teilchenindizes i_{NN1} und i_{NN2} der beiden nächsten Nachbarn - zur Bestimmung des Ladungsvorzeichens dieser Teilchen - werden auf Magnetplatte geschrieben.

Für jede Teilchenzahl N wird dieses Experiment bis zu $2 \cdot 10^4$ Mal wiederholt. Die Tabelle 3.1 gibt einen Überblick über die bei den jeweiligen Teilchenzahlen erreichte Zahl der Experimente. Da sich die Genauigkeit der Monte-Carlo-Ergebnisse nur

proportional zu $M^{-1/2}$ (M = Anzahl der Experimente) verbessert, sollte bei den Mittelwerten mit Fehlern zwischen einem und äußerstenfalls zehn Prozent zu rechnen sein (siehe Abschnitt 3.1.2).

N	M
2^3 = 8	20000
2^5 = 32	20000
2^7 = 128	10000
2^9 = 512	10000
2^{11} = 2048	5000
2^{13} = 8192	2500
2^{15} = 32768	1000
2^{17} = 131072	1000
2^{19} = 524288	1970
2^{21} = 2097152	1341
2^{23} = 8388608	1143
2^{25} = 33554432	972
10^8	257

Tab. 3.1: Anzahl M der Experimente bei der Teilchenzahl N

Aus den gespeicherten Daten können dann nach Abschluß der Simulationen die Verteilungsfunktion und die statistischen Kenngrößen des Mikrofeldes berechnet werden.

Für die Simulationen wurde ein Fortran-Programm mit Unterprogrammen in Maschinensprache erstellt. Die empfindliche Akkumulation des Gesamtfeldes aus den Einzelfeldern (vgl. /39/) wurde in doppelter Genauigkeit (64 bit) durchgeführt. Da die Rechnungen fast zehntausend Stunden Rechenzeit auf einem Siemens-Rechner Typ 7.760 des Rechenzentrums der Universität Düsseldorf benötigten, mußte bei den Programmen besonderer Wert auf Datensicherung und Wiederstartfähigkeit gelegt werden.

3.1.2 Auswertung und Vergleich mit der Theorie

Durch die Normierung der Simulationsdaten auf die Holtsmarksche Normalfeldstärke E_0 (Gleichung 2.28) sind alle Ergebnisse für $\beta = E / E_0$ dichteunabhängig. Die Feldverteilungsfunktionen werden mit der "shifted-histogram"-Technik /51/, die zu einer Varianzreduktion und damit "glatteren" Verteilungen führt, durch Einteilung des Feldstärkenbereichs $\beta = 0, \ldots, \beta_M = 8$ (siehe Abschnitt 2.2.3) in 64 "Kanäle" und achtmaliges Verschieben um je 1/8 der Kanalbreite aufgenommen, während die Momente direkt berechnet werden. In den Abbildungen 3.1 bis 3.4 sind die Verteilungen des Gesamtfeldes, des Feldes des dem Aufpunkt nächsten Nachbarn ("nearest-neighbour"), des Nahfeldes (Feld der beiden dem Aufpunkt nächsten Nachbarn) und des Fernfeldes (Feld der restlichen N-2 Teilchen) für die drei Teilchenzahlen N = 8, N = 128 und N = 8192 exemplarisch dargestellt. Das Feld des nächsten Nachbarn und das Nahfeld sind (im Rahmen der Fehlergrenzen) unabhängig von der Gesamtteilchenzahl, wie es sein sollte. Aus Abb. 3.4 ist deutlich das im Vergleich sowohl zur "nearest-neighbour"- als auch zur Holtsmark-Verteilung völlig andere Verhalten des Fernfeldes zu erkennen. Die langsame Verschiebung der Gesamtfeld- und der Fernfeld-Verteilung mit der Teilchenzahl zeigt sich natürlich noch besser in den Momenten der Verteilungen. Deshalb wird der Gang einiger, auf die Holtsmarksche Normalfeldstärke E_0 (Gleichung 2.28) normierter Momente in Abhängigkeit von der Teilchenzahl in doppeltlogarithmischer Darstellung durch die Abbildungen 3.5 bis 3.7 verdeutlicht.

Zunächst ist in Abb. 3.5 (mit einer linearen Ordinate mit unterdrücktem Nullpunkt!) der Median des Gesamtfeldes für kleine Teilchenzahlen (bis zu $N = 10^4$) zusammen mit den nach der Theorie für endliche Teilchenzahlen gemäß Abschnitt 2.2.2 geltenden Werten dargestellt. Die grobe Abschätzung nach Gleichung 2.45 zeigt schon ab $N \approx 100$ eine sehr gute Übereinstimmung mit der genaueren Näherung nach Gleichung 2.44. Aus dem Vergleich dieser theoretischen Werte mit den experimentellen Werten ist der weiter oben bereits angegebene relative Fehler abzulesen (siehe auch Abb. 3.11). In Abb. 3.6 ist nun dieser Anstieg von Median und Mittelwert des Gesamtfeldes mit der Teilchenzahl N bis $N \approx 10^3$ im linken Teil der Abbildung zu erkennen. Der Mittelwert erreicht einen Maximalwert bei $N \approx 5000$

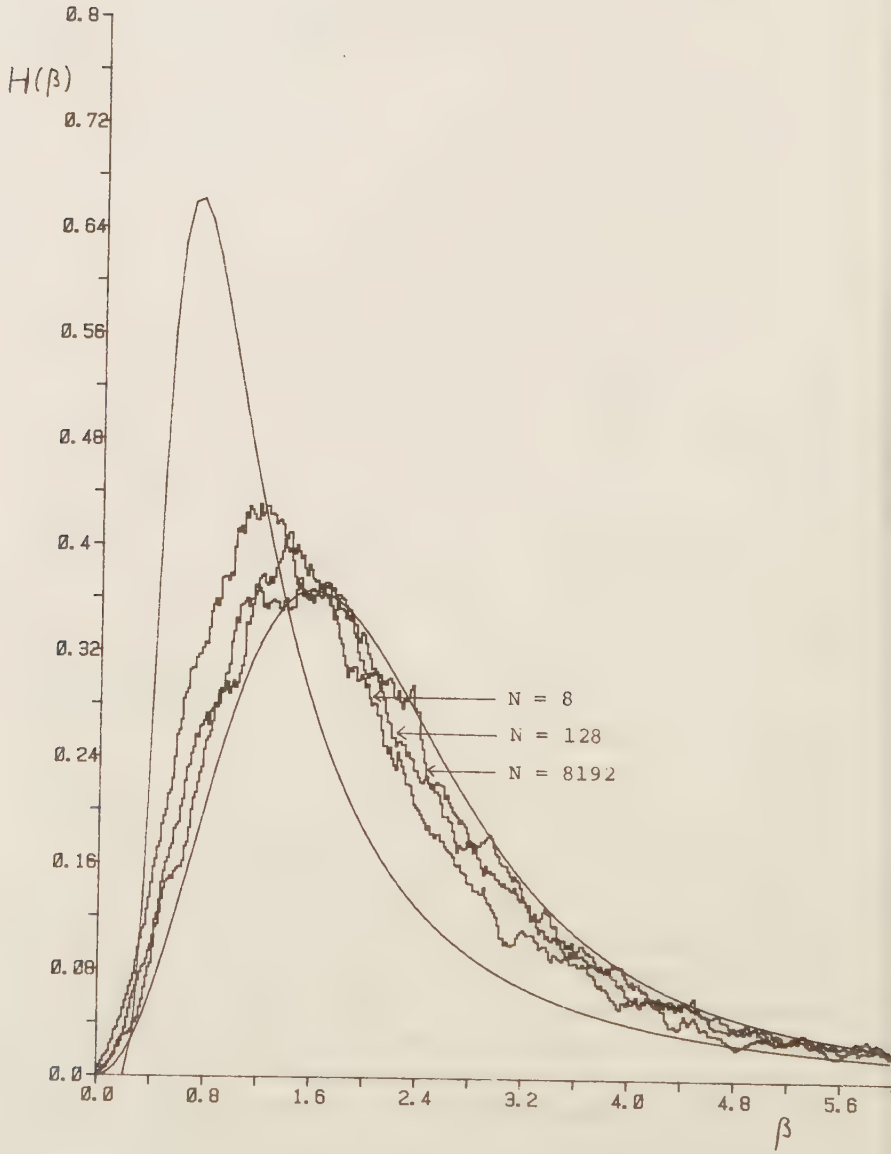


Abb. 3.1: Gesamtfeld-Verteilung des simulierten Systems bei N=8, N=128 und N=8192 Teilchen im Vergleich zur theoretischen "nearest-neighbour"- und Holtsmark-Verteilung

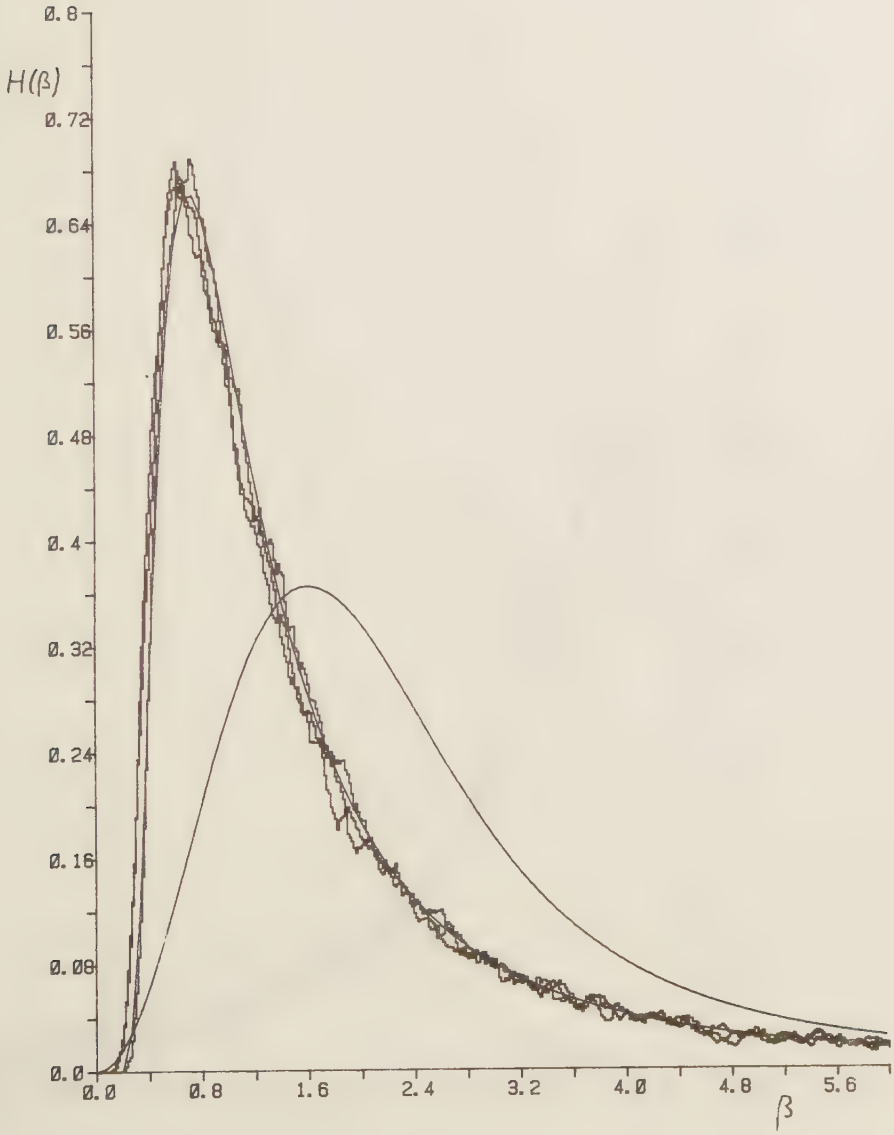


Abb. 3.2: Feldverteilung des dem Aufpunkt nächsten Nachbarn im simulierten System bei N=8, N=128 und N=8192 Teilchen im Vergleich zur theoretischen "nearest-neighbour"- und Holtsmark-Verteilung

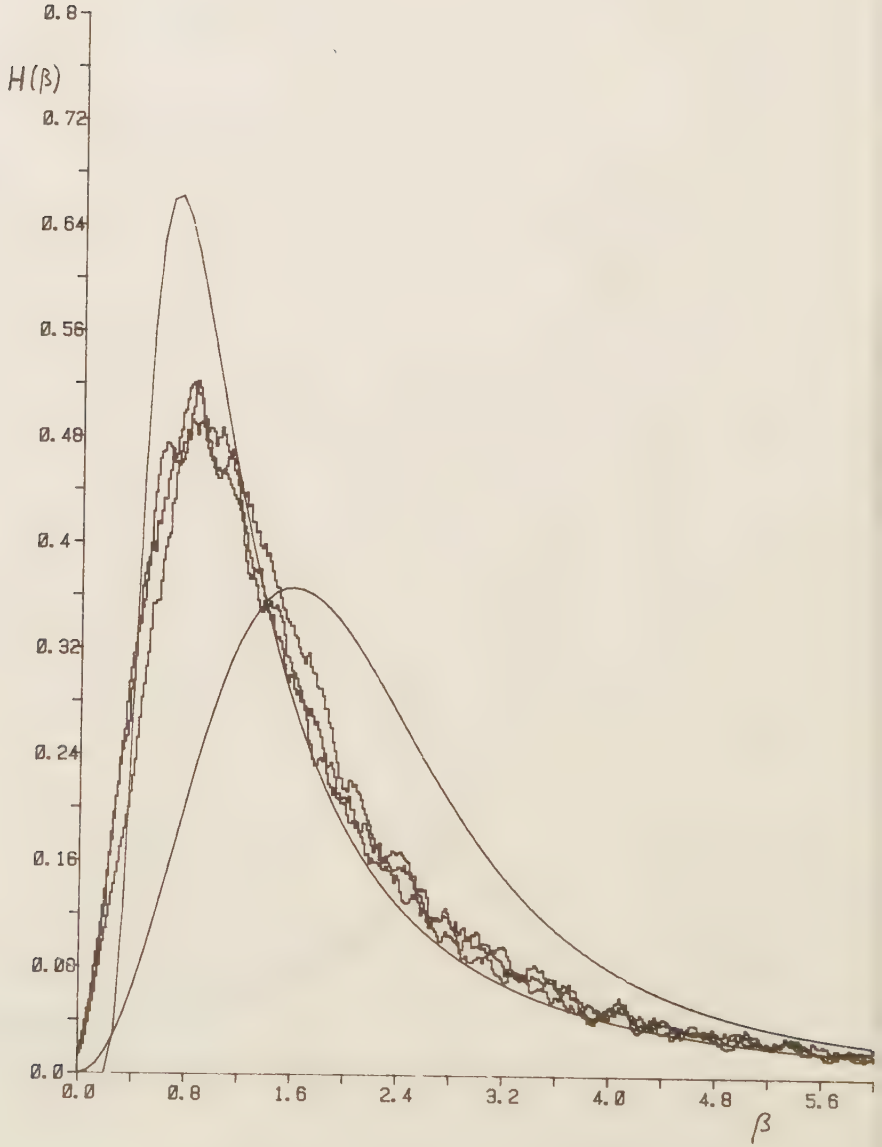


Abb. 3.3: Nahfeld-Verteilung des simulierten Systems bei N=8, N=128 und N=8192 Teilchen im Vergleich zur theoretischen "nearest-neighbour"- und Holtsmark-Verteilung (Nahfeld = Feld der ersten beiden dem Aufpunkt nächstbenachbarten Teilchen zusammen)

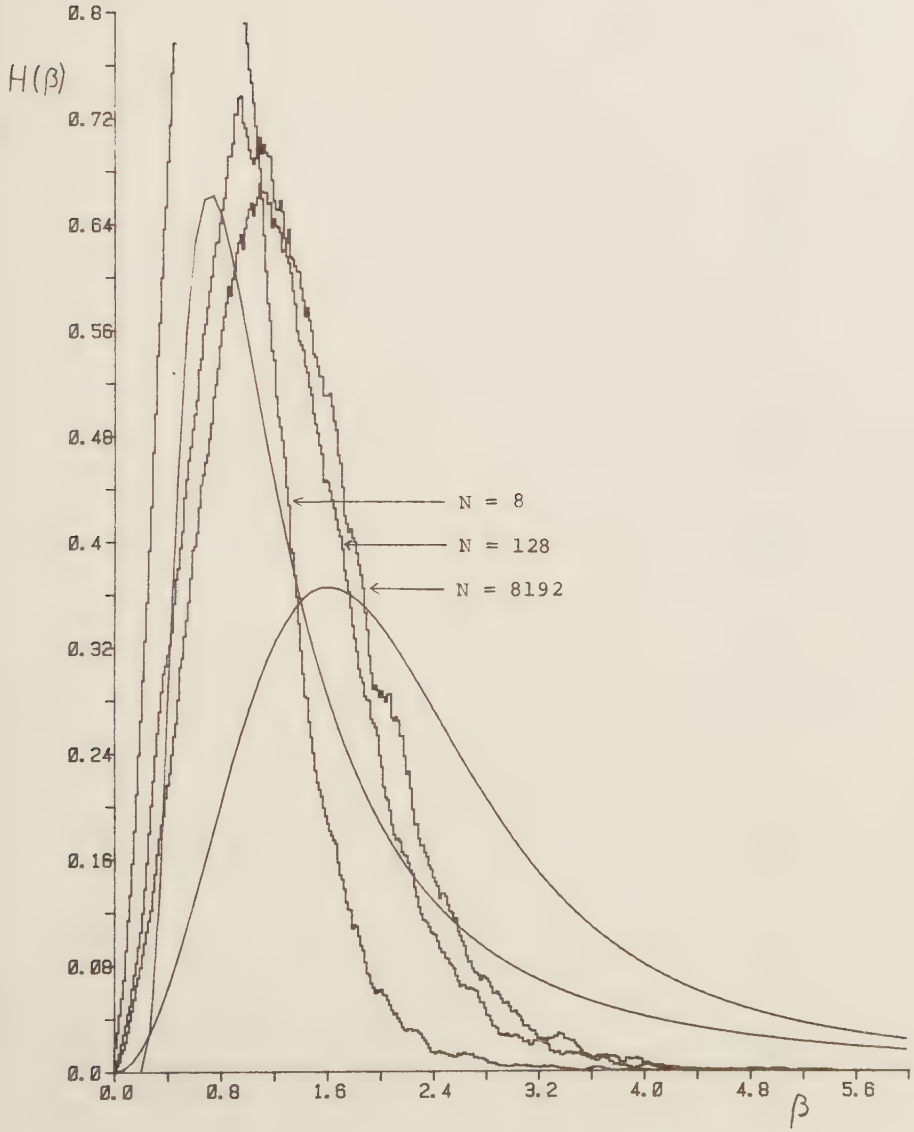


Abb. 3.4: Fernfeld-Verteilung des simulierten Systems bei N=8, N=128 und N=8192 Teilchen im Vergleich zur theoretischen "nearest-neighbour"- und Holtsmark-Verteilung

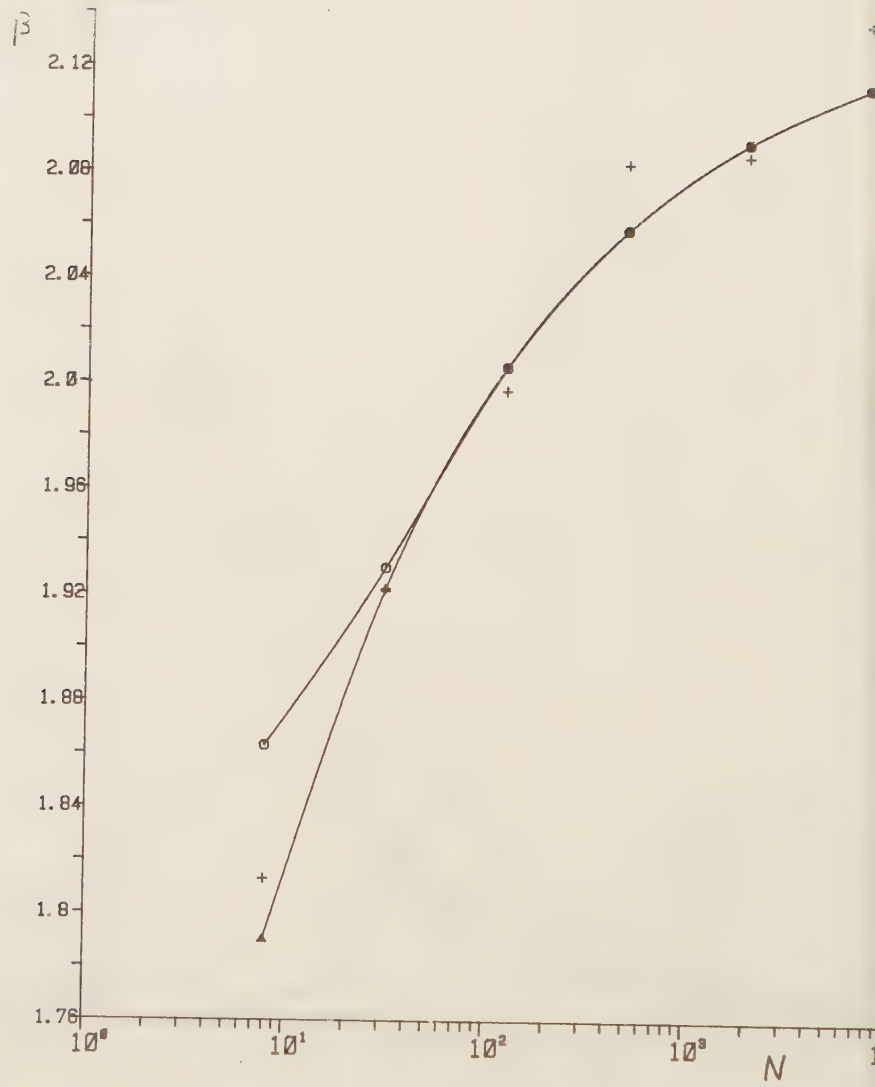


Abb. 3.5: Vergleich zwischen Medianwert (+) des Gesamtfeldes und der Holtsmark-Theorie für endliche Teilchenzahlen nach Gleichung 2.44 (⊙) und 2.45 (▲) in Abhängigkeit von der Teilchenzahl N. Gestrichelt ist der nach der Holtsmark-Theorie geltende Wert für $N \to \infty$ eingezeichnet.

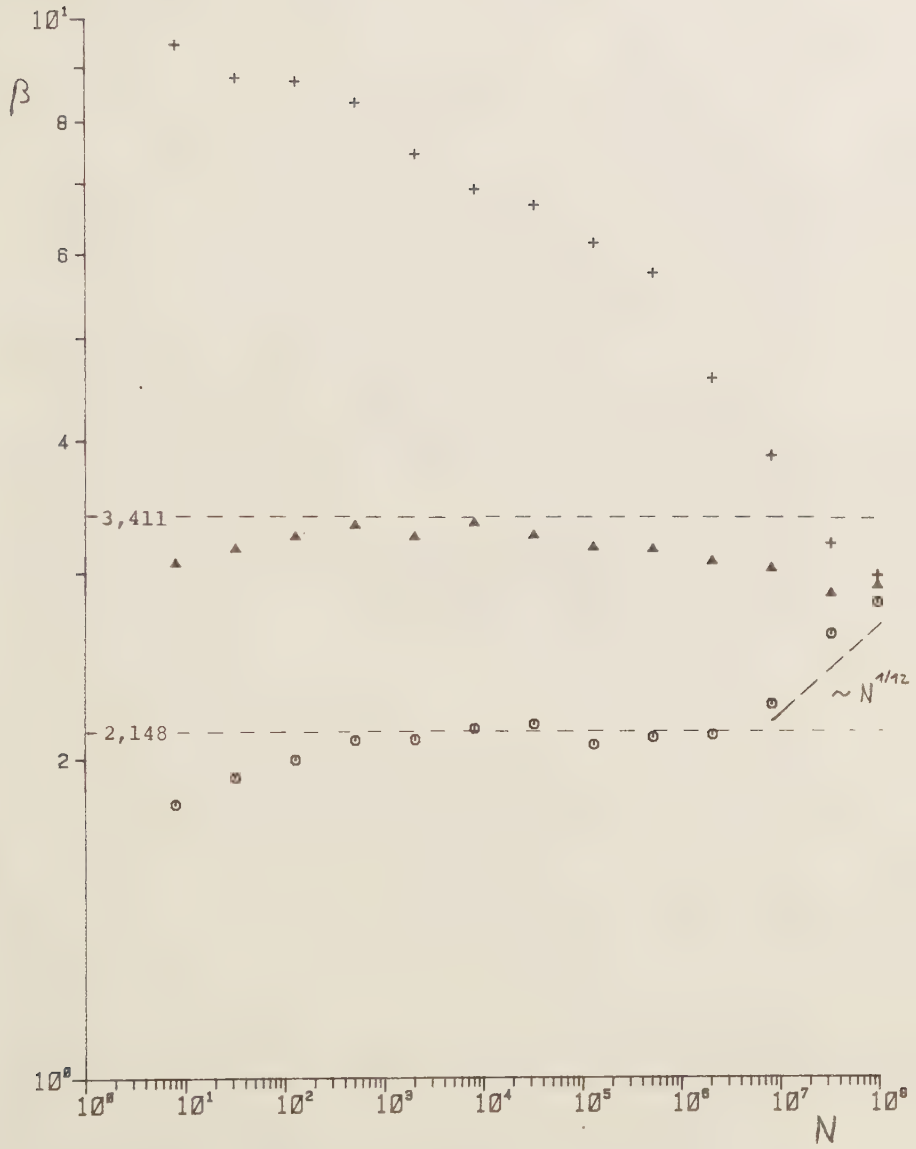


Abb. 3.6: Median (⊙), Mittelwert (▲) und Wurzel aus dem zweiten Moment (+) für das auf die Holtsmarksche Normalfeldstärke normierte Gesamtfeld des simulierten Systems in Abhängigkeit von der Teilchenzahl N. Gestrichelt die nach der Holtsmark-Theorie für $N \to \infty$ geltenden Werte, wobei das zweite Moment nicht existiert.

- wobei dieser Wert noch etwa 2% unter dem von der Holtsmark-Theorie geforderten Wert liegt - und sinkt bei weiter wachsenden Teilchenzahlen im untersuchten Bereich wieder etwas ab. Dagegen steigt der Medianwert des Gesamtfeldes im gesamten untersuchten N-Bereich durchweg an. Dies beruht auf dem Einfluß des Fernfeldes (Abb. 3.7), das mit wachsender Teilchenzahl stärker hervortritt; sowohl Medianwert als auch Mittelwert des Fernfeldes wachsen kontinuierlich an, wobei kleine Schwankungen in den Werten durch die bei höheren Teilchenzahlen abnehmende Anzahl der Experimente (siehe Tabelle 3.1) auftreten.

Das Gesamtfeldquadrat (Abb. 3.6) entfernt sich zunehmend vom Holtsmarkschen Verhalten, welches durch ein unendlich großes zweites Moment charakterisiert wäre. Umgekehrt wächst das Fernfeldquadrat mit wachsender Teilchenzahl an und nähert sich dem Gesamtfeldquadrat, so daß gemäß der Hunger-Larenz-Theorie (siehe Abschnitt 2.4) ab $N \approx 10^8$ für alle drei Kurven in Abb. 3.6 ein gemeinsames Anwachsen proportional zu $N^{1/12}$ zu erwarten sein sollte, nachdem der Median ein solches Verhalten schon ab $N \approx 10^6$ andeutet.

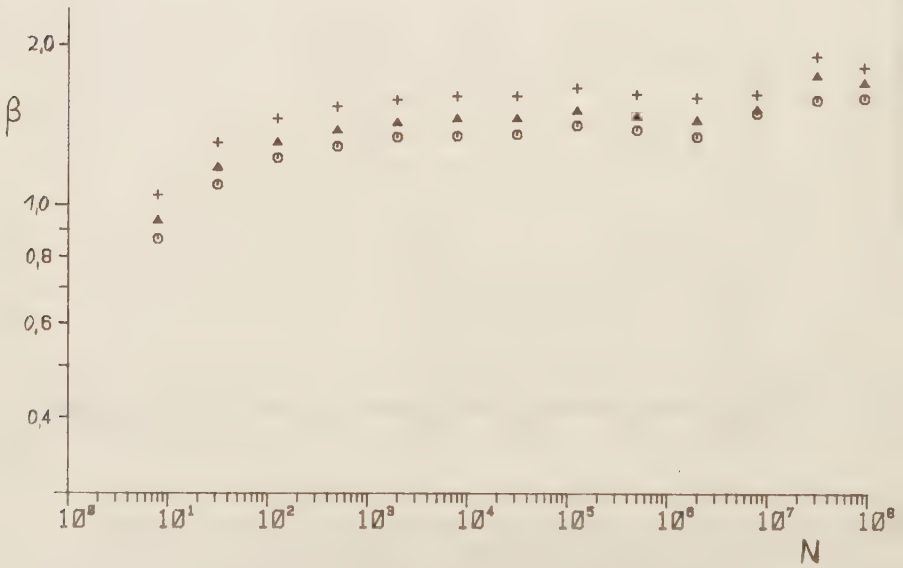


Abb. 3.7: Median (⊙), Mittelwert (▲) und Wurzel aus dem zweiten Moment (+) für das auf die Holtsmarksche Normalfeldstärke normierte Fernfeld des simulierten Systems in Abhängigkeit von der Teilchenzahl N

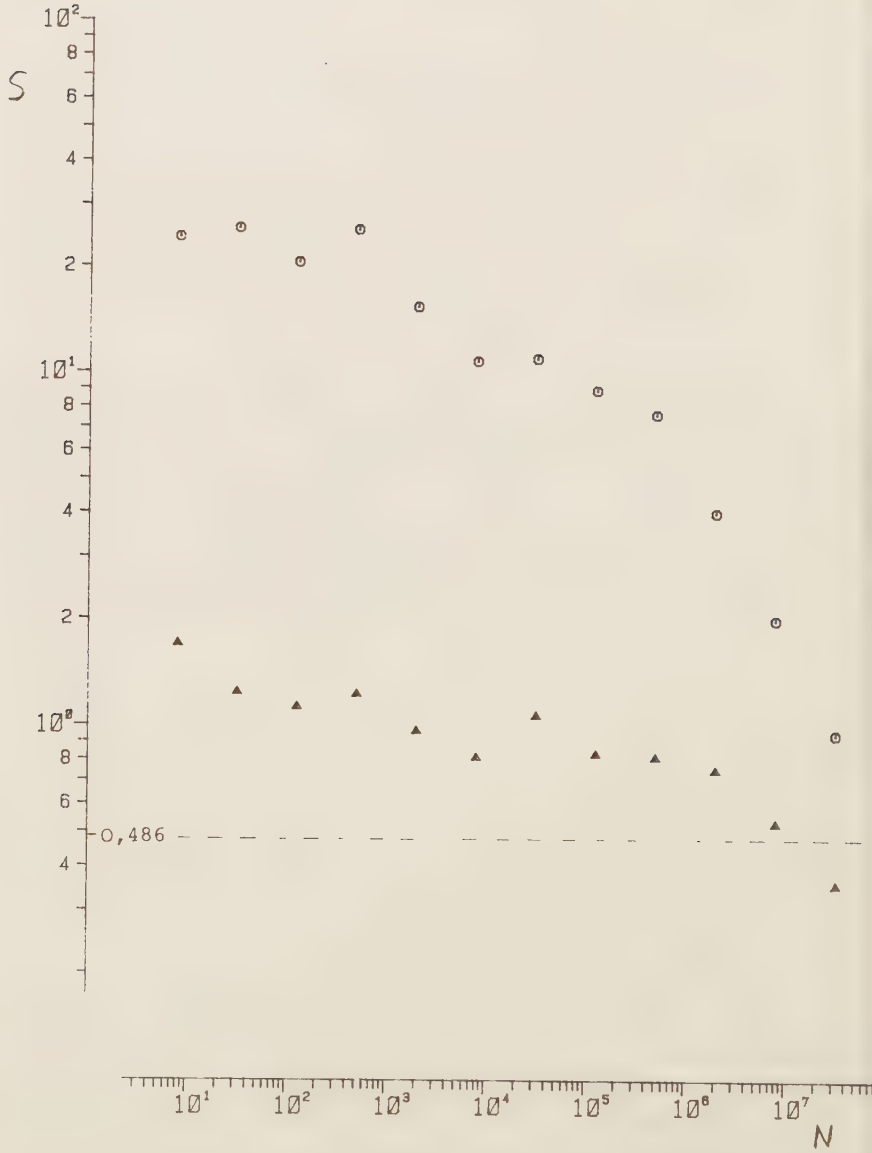
Auch für die höheren Momente gilt dies, wie der Verlauf der sog. "Schiefe"

$$S = \frac{\langle (\beta - \langle\beta\rangle)^3 \rangle}{\langle (\beta - \langle\beta\rangle)^2 \rangle^{3/2}} \tag{3.5}$$

in Abb. 3.8 zeigt. Zwar stammt diese Kennzahl aus der Statistik-Theorie für eindimensionale Verteilungen, aber die monotone Abnahme der Schiefe mit wachsender Teilchenzahl deutet auch im Fall der dreidimensionalen Verteilung auf ein Verhalten des Gesamtfeldes in Richtung auf eine Gaußverteilung hin /52/, zumal der aus der Theorie für $N \to \infty$ folgende theoretische Grenzwert S = 0,486 fast erreicht wird.

Die Verhältnisse $\frac{\beta_{med}}{\langle\beta\rangle}$ (Medianwert des Feldes normiert auf den Feldmittelwert) und $\frac{\langle\beta\rangle}{\langle\beta^2\rangle^{1/2}}$ (Feldmittelwert normiert auf die Wurzel aus dem mittleren Feldquadrat) zeigen für das Fernfeld (Abb. 3.9) schon für kleine Teilchenzahlen eine sehr gute Annäherung an die theoretischen Zahlenwerte für eine Gaußverteilung (0,964 und 0,921), die in der Abbildung auch markiert sind. Die verbleibende, mit zunehmendem N kleiner werdende Abweichung läßt sich mit der bei den Simulationen immer endlichen Maximalfeldstärke erklären, was zu einer endlichen Verteilung (im Sinne von Abschnitt 2.2.3) und damit zur Bevorzugung kleinerer Feldstärken führt. Die gleichen Verhältnisse sind in Abb. 3.10 auch für das Gesamtfeld dargestellt. Weil im Gesamtfeld bei kleinen Teilchenzahlen der Einfluß der nächsten Nachbarn noch vorherrscht, ergibt sich ein Gang mit der Teilchenzahl, der zeigt, daß die Fernfeldbeiträge langsam zunehmen und schließlich den Holtsmarkschen Anteil überwiegen, so daß diese Verhältnisse sich den (ebenfalls markierten) theoretischen Gaußschen Grenzwerte annähern.

Die eingangs erwähnten Experimente von Bailey /49/ und Gervat u. Rossignol-Guzzi /50/ konnten aufgrund der geringen Teilchenzahlen ($N \leq 128$) nur niedrigere Feldmittelwerte als von der Holtsmark-Theorie gefordert (vgl. Abb. 3.5) liefern und sind daher für den Grenzfall $N \to \infty$ nicht repräsentativ.



Schiefewert S für das Gesamtfeld (●) und für das Fernfeld (▲) in Abhängigkeit von der Teilchenzahl N. Der für eine Gaußverteilung geltende Wert ist gestrichelt eingezeichnet.

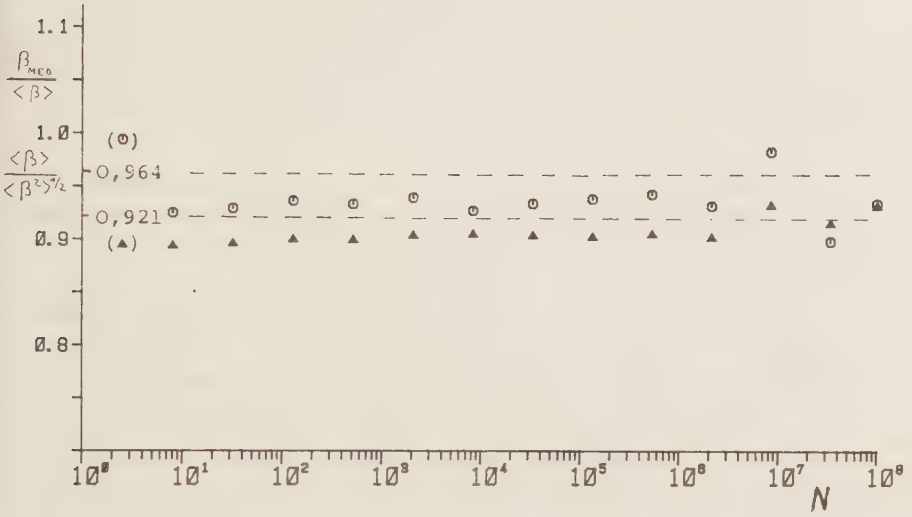


Abb. 3.9: Fernfeld-Median (⊙) normiert auf den Mittelwert und Fernfeld-Mittelwert (▲) normiert auf die Wurzel aus dem mittleren Feldstärkenquadrat in Abhängigkeit von der Teilchenzahl N. Gestrichelt eingezeichnet sind die für eine Gaußverteilung geltenden Werte.

3.1.3 Einfluß geänderter Simulationsbedingungen

Da die bisher beschriebenen Monte-Carlo-Experimente alle für ein würfelförmiges Simulationsvolumen bei Quasineutralität durchgeführt wurden, um die Rechenzeit zu minimieren, sollen die Auswirkungen dieser speziellen Bedingungen im Vergleich zu abgeänderten Verhältnissen kurz untersucht werden.

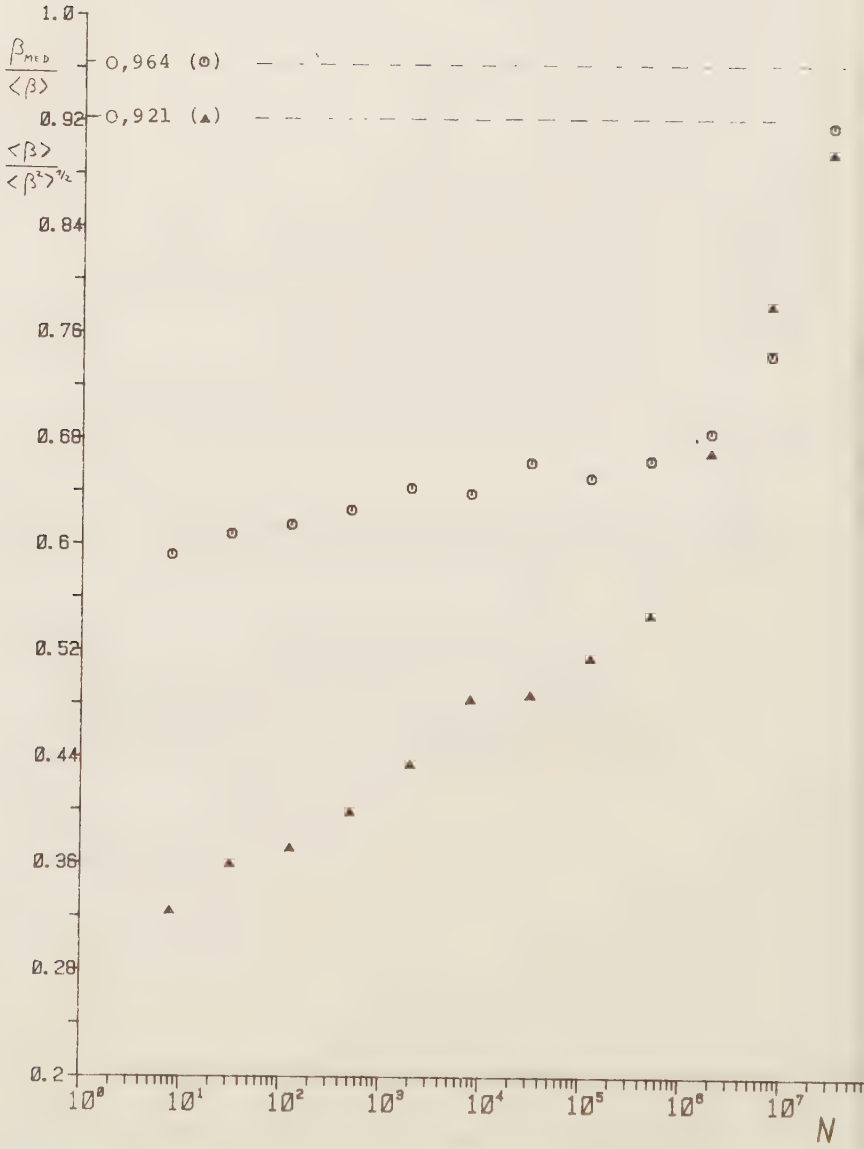


Abb. 3.10: Gesamtfeld-Median normiert auf den Mittelwert (⊙) und Gesamtfeld-Mittelwert normiert auf die Wurzel aus dem mittleren Feldstärkenquadrat (▲) in Abhängigkeit von der Teilchenzahl N. Gestrichelt die für eine Gaußverteilung geltenden Werte.

3.1.3.1 Einfluß der Geometrie

Um den Einfluß der Geometrie des Simulationsvolumens auf das Mikrofeld zu bestimmen, werden zusätzlich für einige Teilchenzahlen Experimente mit kugelförmigen Plasmavolumen durchgeführt. Wie schon in Abschnitt 2.2.2 erwähnt, soll sich bei endlichen Teilchenzahlen der Unterschied zwischen Kugel- und Würfelgeometrie in dem Faktor g in Gleichung 2.45 ausdrücken (g = 1 für Kugelgeometrie und g = 0,984 für Würfelgeometrie nach Larenz /53/).

Da die Rechnungen für Kugelgeometrie aufwendiger sind als für würfelförmige Geometrie, wurden nur Teilchenzahlen bis $N = 2^{10} = 1024$ untersucht. Der dabei gewonnene Mittelwert des Mikrofeldes ist in Abb. 3.11 im Vergleich mit dem der ursprünglichen Simulation dargestellt, wobei beide Werte für das Feldstärkenintervall $\beta = 0, \ldots, \beta_M = 8$ ermittelt wurden. Es ist zu erkennen, daß der Unterschied zwischen beiden Kurven nur wenige Prozent ausmacht, was auch etwa der Genauigkeit der Experimente entsprechen sollte (vgl. Abschnitt 3.1.1). Aber das mit wachsender Teilchenzahl recht gleichmäßig gegen 1 laufende Verhältnis der Mittelwerte (siehe Tabelle 3.2) läßt auf die Konsistenz der dargestellten Werte schließen. Es ergibt sich im Rahmen der Genauigkeit für den oben erwähnten Faktor $g_{exp} = 0,51$ als experimentell ermittelter Wert im Fall der Feldmittelwerte, wenn man die Näherungsformel 2.45 auch für die Feldmittelwerte benutzen will, und zwar sowohl für Kugel- als auch für Würfelsymmetrie. Dagegen wird für den Median der theoretische Faktor g = 1 gut bestätigt, sofern nicht aufgrund extremer Genauigkeit zwischen den obigen Werten 1 und 0,984 unterschieden werden soll.

N	$\frac{\langle \beta_K \rangle}{\langle \beta_W \rangle}$
32	1,0085
64	1,0076
128	1,0087
256	1,0056
512	1,0030
1024	1,0026

Tab. 3.2: Verhältnis der Feldmittelwerte für Kugel- (β_K) und Würfelgeometrie (β_W) in Abhängigkeit von der Teilchenzahl N

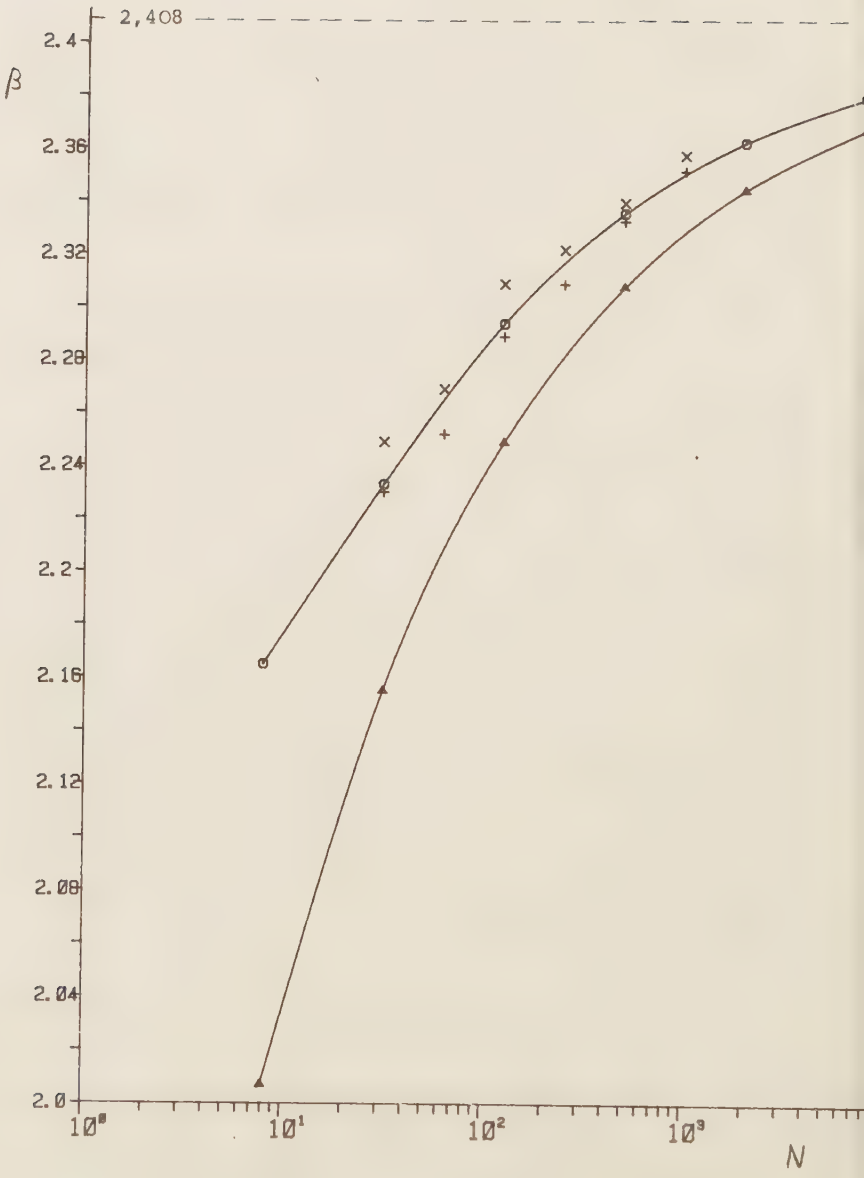


Abb. 3.11: Vergleich des Feldstärkenmittelwerts bei würfelförmiger (+) und kugelförmiger (×) Geometrie in Abhängigkeit von der Teilchenzahl N. Zusätzlich sind die Näherungen für Kugelgeometrie nach Gl. 2.44 (⊙) und Gl. 2.45 (▲) angegeben. Der nach Holtsmark für $N \rightarrow \infty$ geltende Grenzwert ist gestrichelt.

Die gegenüber der Würfelgeometrie etwas höheren Feldmittelwerte der Experimente bei Kugelgeometrie lassen sich durch den bei wachsender Teilchenzahl abnehmenden Einfluß der (vom Aufpunkt relativ weit entfernten und zu im Mittel schwächeren Feldern führenden) Würfelecken, erklären. Im Rahmen der vorliegenden Genauigkeit braucht aber bei den Mittelwerten nicht zwischen Kugel- und Würfelgeometrie unterschieden zu werden.

3.1.3.2 Einfluß von Ladungsschwankungen

Die bisherigen Experimente beziehen sich sämtlich auf ein insgesamt neutrales Plasma, das heißt

(3.6) $$\sum_{i=1}^{N} e_i = 0 \quad .$$

Da in realen Plasmen Raumladungen in begrenzten Bereichen durch lokale Ladungsverschiebungen möglich sind, wurden auch Simulationen von Plasmen durchgeführt, deren Gesamtladung Q innerhalb des Volumens V schwankt, aber nur so, daß im Mittel Q gleich Null ist. Für die Ermittlung des Ladungsvorzeichens eines jeden einzelnen Teilchens wird ein weiterer, von den Koordinatengeneratoren unabhängiger Zufallszahlengenerator eingesetzt. Im Mittel über viele Experimente ergibt sich dann bei der Teilchenzahl N ein mittleres Ladungsschwankungsquadrat bzw. Ladungsquadrat

(3.7) $$\langle \Delta Q^2 \rangle = \langle Q^2 \rangle = e_0^2 N$$

(siehe Tabelle 3.3). Sowohl die Zahl der Experimente als auch

N	M	$\frac{\langle \Delta Q^2 \rangle^{1/2}}{e_0}$	$N^{1/2}$
8	20000	2,83	2,83
32	20000	5,68	5,66
128	10000	11,3	11,3
512	10000	22,7	22,6
2048	5000	45,1	45,3
8192	2500	91,6	90,5
32768	1000	182	181
131072	1000	360	362

Tab. 3.3: Mittlere Ladungsabweichung $e_0^{-1} \cdot \langle \Delta Q^2 \rangle^{1/2}$ und Anzahl der Experimente M in Abhängigkeit von der Teilchenzahl N

die Position der Plasmateilchen bleiben gegenüber den ursprünglichen in Abschnitt 3.1.1 beschriebenen Simulationen unverändert, um den Effekt der Ladungsschwankungen in reiner Form zu isolieren.

In Abb. 3.12 ist der Medianwert des Mikrofeldes für diese Experimente mit dem der ursprünglichen Simulationen verglichen. Auch hier gilt das im vorigen Abschnitt Gesagte bezüglich der Genauigkeit. In Tabelle 3.4 ist daher zusätzlich das Verhältnis aus den beiden erwähnten Medianwerten dargestellt. Der gleichmäßige Anstieg dieses Verhältnisses über 1 hinaus (abgesehen von den niedrigsten benutzten Teilchenzahlen) deutet auf einen erhöhten Feldmittelwert der Experimente mit Ladungsschwankung hin, was im Sinne der Theorie von Hunger und Larenz /24, 37/ liegt (vgl. auch die Raumladungsdiskussion in Abschnitt 2.4).

N	$\frac{\beta_{MED,Q}}{\beta_{MED,0}}$
8	0,994
32	0,998
128	1,004
512	1,006
2048	1,013
8192	1,034

Tab. 3.4: Verhältnis der Gesamtfeld-Medianwerte für Systeme mit ($\beta_{MED,Q}$) und ohne ($\beta_{MED,0}$) Ladungsschwankung in Abhängigkeit von der Teilchenzahl N

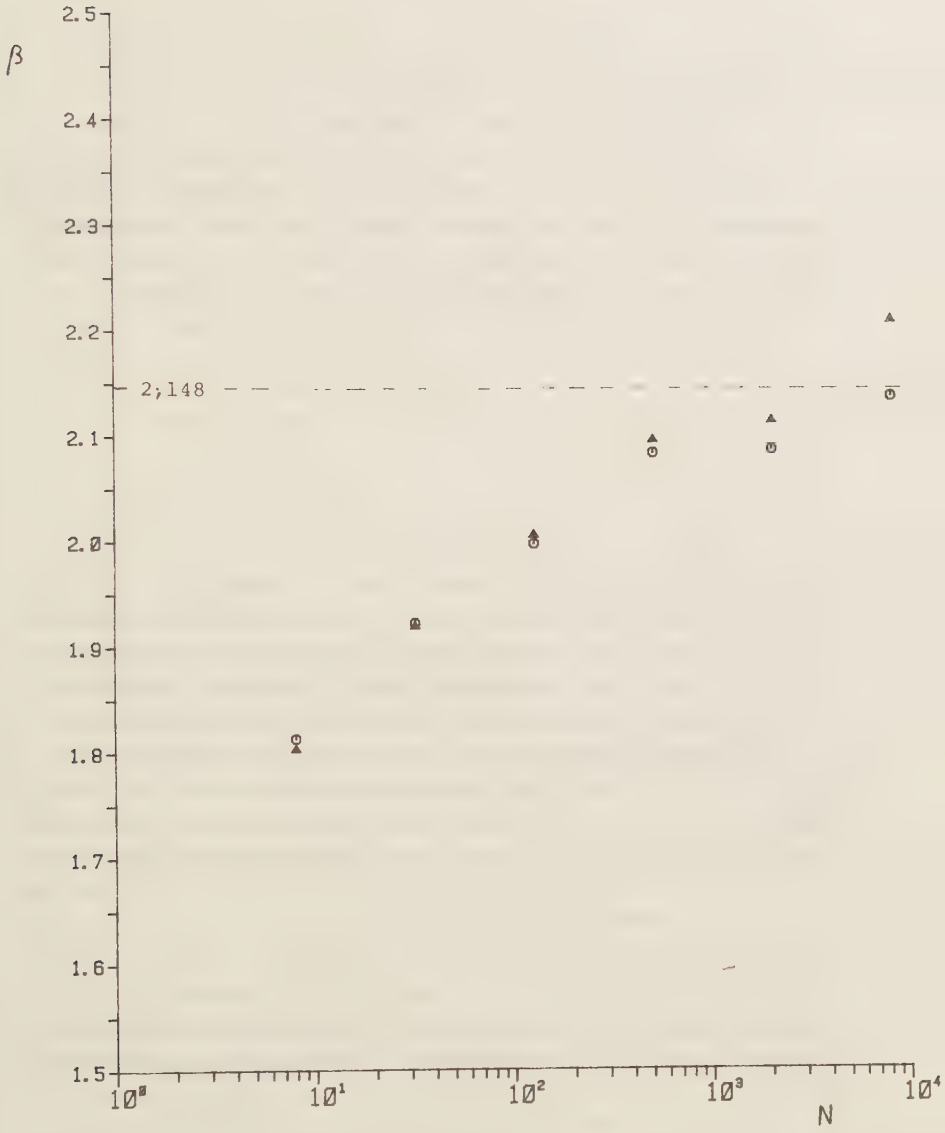


Abb. 3.12: Vergleich des Gesamtfeld-Medians für Systeme ohne (ø) und mit (▲) Ladungsschwankungen in Abhängigkeit von der Teilchenzahl N. Gestrichelt ist der nach Holtsmark geltende Grenzwert für $N \to \infty$.

3.2 Erweiterung der Monte-Carlo-Simulation zur Bestimmung der Dipolmomentdichte

Da von Hunger und Larenz /24/ mit der Beziehung 2.87 ein Zusammenhang zwischen den Fernfeldanteil des Mikrofeldes und der Dipolmomentdichte angegeben wird, sollen die hier diskutierten Simulationen zum Dipolmoment einer Ladungsverteilung zur weiteren Klärung der Fernfeldproblematik dienen.

3.2.1 Beschreibung des Verfahrens

Ähnlich wie in Abschnitt 3.1 für das Mikrofeld beschrieben, wird die Monte-Carlo-Methode benutzt, um das Dipolmoment einer räumlichen Verteilung von Punktladungen im Mittel zu bestimmen. Mit dem Zufallszahlengenerator nach Anhang D, aber mit geändertem Startwert, werden in einem um den Ursprung zentrierten Einheitswürfel in gleicher Weise wie zuvor die Positionen $\vec{r}_i$ (i = 1, ..., N) der N Teilchen generiert. Die Dipolmomentdichte einer Kugel vom Radius R wird nach /24/ gemäß

(3.8) $$\vec{m} = \sum_{i=1}^{N} \frac{e_i \vec{r}_i}{R^3}$$

($e_i = + e_o$ für i = 1, ..., N/2 und $e_i = - e_o$ sonst)
berechnet, wobei der Kugelradius R bei der vorliegenden Würfelgeometrie durch die Kantenlänge l des Würfels ausgedrückt wird:

(3.9) $$\ell^3 = \frac{4\pi}{3} R^3$$

Für die auf die Normalfeldstärke E_o^* nach Gleichung 2.12 bezogene Dipolmomentdichte ergibt sich dann

(3.10) $$\frac{\vec{m}}{E_o^*} = \frac{\sum_{i=1}^{N} e_i \vec{r}_i}{\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/3} \ell^3 e_o n^{2/3}} \cdot$$

Diese Größe wird in M = 5000 bis M = 500 Experimenten für die Teilchenzahlen N = 32 bis $N = 2^{23} \approx 8 \cdot 10^6$ berechnet und gespeichert. Schon bei diesen geringen Experiment-Anzahlen, die weniger als 50 Stunden Rechenzeit auf dem Rechner Cyber 76 des regionalen Rechenzentrums der Universität Köln benötigten, ergeben sich aufgrund des "gutartigen" Verhaltens der Summe in Gleichung 3.8 kleinere relative Fehler als bei den Mikrofeld-Simulationen.

3.2.2 Auswertung und Vergleich mit der Theorie

Aus den gespeicherten Daten werden nach Abschluß der Experimente für den Betrag der Dipolmomentdichte $|\vec{m}|$ Mittelwert und zweites Moment bestimmt. Diese Werte sind in Abb. 3.13 in doppelt-logarithmischem Maßstab in Abhängigkeit von der Teilchenzahl dargestellt. Zusätzlich ist das zweite Moment der Dipolmomentdichte bezogen auf das zweite Moment sowohl des Fernfeldes als auch des Gesamtfeldes aus den Mikrofeldsimulationen nach Abschnitt 3.1.2 angegeben. Während die drei zuerst genannten Größen im untersuchten Bereich eine Abhängigkeit von der Teilchenzahl etwa gemäß $N^{-1/3}$ aufweisen, zeigt das Quadrat der auf das Fernfeldquadrat normierten Dipolmomentdichte insbesondere bei den höchsten simulierten Teilchenzahlen einen fast konstanten Wert. Der völlig parallele Verlauf der oberen beiden Kurven in Abb. 3.13 verdeutlicht nebenbei den Gaußschen Charakter der Dipolmomentdichte-Verteilungsfunktion, wie es nicht anders zu erwarten war.

Wenn man die auf das Fernfeld bezogene Dipolmomentdichte auf einen neuen Kugelradius R' bezieht, der sich so bestimmt, daß die Hunger-Larenzsche Beziehung 2.87 erfüllt wird, dann ergibt sich etwa der effektive Abstand des Bereichs im Simulationsvolumen, aus dem der Fernfeldanteil wesentlich stammt. Für die simulierten Teilchenzahlen liegt das Verhältnis R'/R

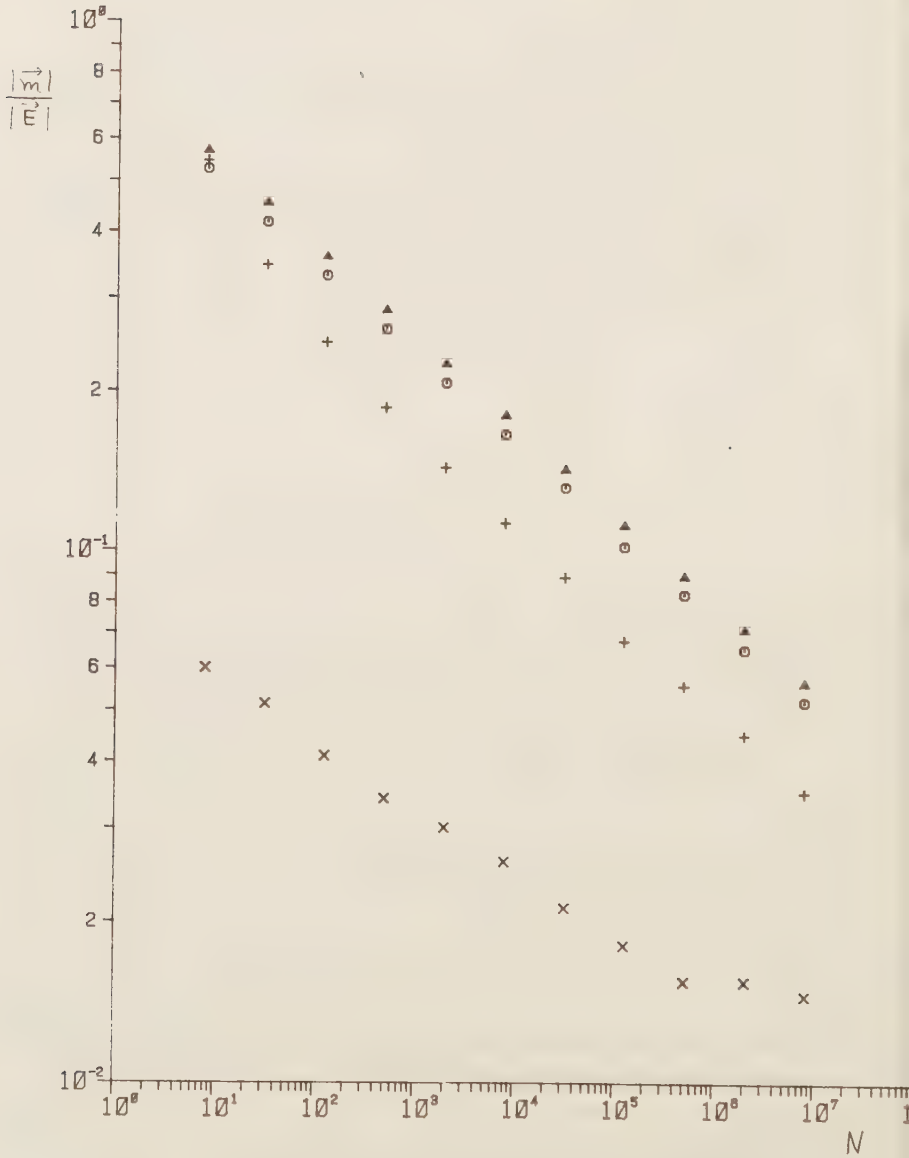


Abb. 3.13: Momente der Dipolmomentdichte des simulierten Systems:

- ⊙ Mittelwert, normiert auf die Holtsmarksche Normalfeldstärke
- ▲ Wurzel aus dem mittleren Quadrat, ebenfalls auf die Holtsmarksche Normalfeldstärke normier
- \+ Wurzel aus dem mittleren Quadrat, normiert auf die Wurzel aus dem mittleren Gesamtfeldquadrat
- × Wurzel aus dem mittleren Quadrat, normiert auf die Wurzel aus dem mittleren Fernfeldquadrat

(siehe Tabelle 3.5) zwischen 0,97 (bei N = 32) und 0,45 (bei $N = 8 \cdot 10^6$), d.h. wie kaum anders zu erwarten, liegt der die Fernfeldbeiträge liefernde Bereich bei kleinen Teilchenzahlen am äußersten Rand des nach Anhang C normierten Volumens, um dann mit wachsendem N deutlich ins Innere zu wandern. (Wegen der konstanten Teilchendichte wächst das erfaßte Volumen mit $N^{1/3}$.)

N	$\frac{R'}{R}$
32	0,97
128	0,86
512	0,78
2048	0,72
8192	0,66
32768	0,61
131072	0,56
524288	0,52
2097152	0,49
8388608	0,45

Tab. 3.5: Verhältnis der Radien R' zu R (Erläuterung im Text) in Abhängigkeit von der Teilchenzahl N

3.3 "Molecular-Dynamics"-Simulation

Die "molecular-dynamics"-Methode zur Simulation physikalischer Vielkörpersysteme wurde erstmalig im Jahre 1959 von Alder und Wainwright /54/ angegeben. Durch numerische Integration der Bewegungsgleichungen wird eine Konfiguration im Phasenraum in ihrer zeitlichen Entwicklung verfolgt. Nach dem Abklingen von "Anfangseffekten" (siehe Abschnitt 3.3.1) können sowohl statische als auch - im Gegensatz zur Monte-Carlo-Methode - dynamische Eigenschaften des Systems in ihrem zeitlichen Verhalten bestimmt werden. Dies kann durch Mittelwertbildung über eine Trajektorie oder über viele Anfangskonfigurationen geschehen. Der Nachteil des "molecular-dynamics"-Verfahrens ist der hohe Rechenzeitaufwand (proportional zu N^2) aufgrund der N-Teilchen-Wechselwirkung.

Unabhängig von Alder und Wainwright (und fast gleichzeitig) benutzte Koller /29/ diese Methode zur Simulation von Plasmen und von Hoerner /55/ zur Simulation von Kugelsternhaufen. Wilke /36/ berechnete mit diesem Verfahren als erster Plasma-Mikrofelder und zeitliche Mikrofeld-Autokorrelationsfunktionen.

Viel benutzt wird die "molecular-dynamics"-Methode zur Simulation von Flüssigkeiten (eine neuere Übersicht ist z.B. in /48/ enthalten); so wurde mit dieser Methode zum ersten Mal das t^{-1}-Abklingen der Geschwindigkeits-Autokorrelationsfunktion in einem zweidimensionalen Modellsystem aus harten Kugeln gezeigt.

Auch die Arbeit von Alder wurde fortgeführt, inzwischen ist die achtzehnte Fortsetzung seiner "Studies in Molecular Dynamics" erschienen /56/; des weiteren haben Hansen und McDonald /57/ in den letzten Jahren im Hinblick auf die Experimente zur Laserfusion erste "molecular-dynamics"-Simulationen sehr dichter Plasmen versucht. Die genannte astronomische bzw. astrophysikalische Anwendung ist natürlich ebenfalls weiter betrieben worden.

3.3.1 Beschreibung des Verfahrens

Mit den Zufallszahlengeneratoren gemäß Anhang D und E werden gleichverteilte Ortskoordinaten $\hat{\vec{r}}_{j0}$ und $\hat{\vec{R}}_{j0}$ (j = 1, ..., N/2) - wie bei der Monte-Carlo-Methode nach Abschnitt 3.1 - und entsprechend der gewünschten Temperatur normalverteilte Geschwindigkeitskomponenten $\hat{v}_{j\gamma}$ und $\hat{V}_{j\gamma}$ (j = 1, ..., N/2 und γ = x, y, z) für die Elektronen und die Ionen bestimmt. Die Geschwindigkeiten werden so gewählt, daß Gesamtimpuls und -drehimpuls des Systems Null sind und daß die mittlere kinetische Energie jeder Teilchensorte der vorgegebenen Temperatur entspricht (siehe Anhang C).

Im simulierten System sollen Coulombkräfte zwischen den Teilchen wirken, so daß die Bewegungsgleichungen lauten:

$$(3.11)\quad m\,\ddot{\vec{r}}_j = e_0^2 \sum_{\substack{i=1\\ i\neq j}}^{\frac{N}{2}} \frac{\vec{r}_j(t)-\vec{r}_i(t)}{|\vec{r}_j(t)-\vec{r}_i(t)|^3} - e_0^2 \sum_{i=1}^{\frac{N}{2}} \frac{\vec{r}_j(t)-\vec{R}_i(t)}{|\vec{R}_j(t)-\vec{r}_i(t)|^3} \qquad j = 1, \ldots, \frac{N}{2}$$

$$(3.12)\quad M\,\ddot{\vec{R}}_j = e_0^2 \sum_{\substack{i=1\\ i\neq j}}^{\frac{N}{2}} \frac{\vec{R}_j(t)-\vec{R}_i(t)}{|\vec{R}_j(t)-\vec{R}_i(t)|^3} - e_0^2 \sum_{i=1}^{\frac{N}{2}} \frac{\vec{R}_j(t)-\vec{r}_i(t)}{|\vec{R}_j(t)-\vec{r}_i(t)|^3}$$

mit den Anfangsbedingungen

$$(3.13)\quad \vec{r}_j(t=0) = \vec{r}_{j0}\,, \qquad \vec{R}_j(t=0) = \vec{R}_{j0}\,,$$

$$(3.14)\quad \dot{\vec{r}}_j(t=0) = \vec{v}_j\,, \qquad \dot{\vec{R}}_j(t=0) = \vec{V}_j\,.$$

Durch Verwendung der in Anhang C angegebenen Größen lassen sich die Gleichungen auf eine dimensionslose Form bringen:

$$(3.15)\quad \ddot{\hat{r}}_j(\hat{t}) = \sum_{\substack{i=1\\ i\neq j}}^{\frac{N}{2}} \frac{\hat{r}_j(\hat{t})-\hat{r}_i(\hat{t})}{|\hat{r}_j(\hat{t})-\hat{r}_i(\hat{t})|^3} - \sum_{i=1}^{\frac{N}{2}} \frac{\hat{r}_j(\hat{t})-\hat{R}_i(\hat{t})}{|\hat{r}_j(\hat{t})-\hat{R}_i(\hat{t})|^3}$$

und analog für Gleichung 3.12.

Die schrittweise numerische Integration dieser Gleichungen erfordert eine Diskretisierung, welche in Anlehnung an die "leapfrog"-Methode /58/ als Verfahren zweiter Ordnung so gewählt wird, daß bei hoher Genauigkeit die zeitaufwendige Auswertung der rechten Seiten der Bewegungsgleichungen möglichst selten nötig wird:

(3.16) $$\vec{r}_j(t+\Delta t) = \vec{r}_j(t) + \Delta t\left(\vec{v}_j(t) + \frac{\Delta t}{2}\vec{b}_j(t)\right)$$

(3.17) $$\vec{b}_j(t+\Delta t) = \ldots\left(\vec{r}(t+\Delta t)\right)\ldots$$

(3.18) $$\vec{v}_j(t+\Delta t) = \vec{v}_j + \frac{\Delta t}{2}\left(\vec{b}_j(t) + \vec{b}_j(t+\Delta t)\right)$$

Die Berandungen des Simulationsvolumens sollen auftreffende Teilchen spiegelnd reflektieren.

Analoge Gleichungen gelten für die Ionen, bis auf einen zusätzlichen Faktor 1/M auf den rechten Seiten der Beschleunigungsgleichung 3.15, für den in der vorliegenden Arbeit erstmals für derartige Rechnungen der realistische Wert 1/1836 benutzt wird, der Protonen entspricht.

Für jeden Integrationsschritt wird die Schrittweite Δt proportional zum Quadrat des Minimalabstands zweier Teilchen neu bestimmt, um auch bei großen Beschleunigungen genaue Bahnkurven zu erhalten. Nach Erreichen fester Zeitintervalle δt (etwa 10^{-13} sec, bei mittleren Integrationsschrittweiten von $5\ 10^{-15}$ sec für die Simulationsbedingungen mit $n = n_i + n_e = 10^{16}$ cm^{-3} und $T = 10^4$ K, d.h. $\alpha^2 = 28$) wird das elektrische Feld der Elektronen und der Ionen berechnet und zusammen mit Informationen über Zeit, Gesamtenergie und Minimalabstand (insgesamt neun skalare Größen) auf Magnetplatte gespeichert. Wenn eine Zeitspanne von 11 Ionenplasmafrequenzperioden bzw. 470 Elektronenplasmafrequenzperioden ($11\ \omega_{pi}^{-1} \approx 470\ \omega_{pe}^{-1} = 10^{-9}$ sec) verstrichen ist, wird die Integration beendet und das gesamte Verfahren mit neuen Anfangsbedingungen bei gleicher Temperatur und Dichte wieder gestartet. Dies geschieht zehn Mal für jede der Teilchenzahlen N = 32, N = 64, N = 128 und $N = 256 = 2^3 \cdot 32$ (das ist ein Faktor 2 in jeder Raumdimension gegnüber der niedrigsten Teilchenzahl), so daß jeweils Simulationsaaten über $110\ \omega_{pi}^{-1}$ zur Verfügung stehen. Durch diesen mehrfachen Beginn mit unterschiedlichen Anfangsbedingungen wird eine zu starke Energieabweichung vom an sich konstant zu haltenden Anfangswert (siehe unten) vermieden.

Wegen der N-Teilchen-Wechselwirkung wächst die für diese Simulationen benötigte Rechenzeit proportional zu N^2, weshalb auf den verfügbaren Rechnern nur mit Teilchenzahlen bis zu N = 256 gearbeitet werden kann. Außerdem bereiten die wegen des realistischen Massenverhältnisses (siehe oben) unter-

schiedlichen Zeitskalen für die Elektronen und die Ionen Probleme bei der numerischen Integration. Trotzdem wird mit den erstellten Programmen erreicht, daß die Gesamtenergie, die eine empfindliche Kontrollgröße für die Güte der numerischen Integration darstellt, über die genannte Simulationszeit nahezu konstant bleibt. In Abb. 3.14 sind die kurzzeitigen Schwankungen der Gesamtenergie W(t) über einen Zeitraum von etwa $1 \cdot \omega_{p_i}^{-1}$ dargestellt. Wie die nächste Abbildung (3.15) in typischer Weise für alle Simulationen zeigt, beträgt die Energieabweichung für die gesamte Dauer einer Simulation weniger als 10%. Sie geht im wesentlichen auf Rundungs- und Abschneidefehler des Computers und des Integrationsverfahrens zurück und äußert sich im Mittel als Energiezuwachs, wobei der stärkste Zuwachs auf das "Thermalisieren" zu Beginn der Simulation zurückzuführen ist. Nachdem für die Teilchengeschwindigkeiten schon eine Maxwellverteilung angesetzt ist, beruht dieser Effekt auf den zufällig gewählten Anfangspositionen, welche zu einer gegenüber dem Mittelwert betragsmäßig deutlich zu hohen potentiellen Energie führen können, die erst abgebaut werden muß. Deshalb wird mit allen Auswertungen erst zur Zeit $1 \cdot \omega_{p_i}^{-1}$ begonnen. Die restlichen Energieschwankungen zeigen im Rahmen der numerischen Genauigkeit keine Auswirkungen auf die Momente der Mikrofeldverteilungen.

Der Mittelwert der potentiellen Energie ist für ein elektrisch neutrales Plasma mit $\langle \quad \rangle \gg 1$ betragsmäßig sehr klein gegenüber der kinetischen Energie des gesamten Systems. Daher bewirken auch deutliche Abweichungen vom Mittelwert der potentiellen Energie keine merklichen Änderungen der kinetischen Energie bzw. Temperaturänderungen.

Die folgende Abbildung (3.16) zeigt ein Beispiel für den Verlauf des Minimalabstands r_{min} zwischen je zwei Teilchen, normiert auf den mittleren Teilchenabstand $n^{-1/3}$. Es ist zu sehen, daß bei den gewählten Plasmabedingungen der mittlere Minimalabstand $\langle r_{\quad} \rangle$ zwischen je zwei Teilchen etwa bei einem Zehntel des mittleren Teilchenabstands liegt und daß starke "Stöße" nur selten auftreten.

Alle Rechnungen wurden mit einem selbsterstellten Fortran-Programm auf dem Rechner Cyber 76 des regionalen Rechenzentrums der Universität Köln durchgeführt und benötigten ungefähr fünfhundert Stunden Rechenzeit, so daß besondere Maßnahmen zur Datensicherung und Wiederstartfähigkeit nötig waren.

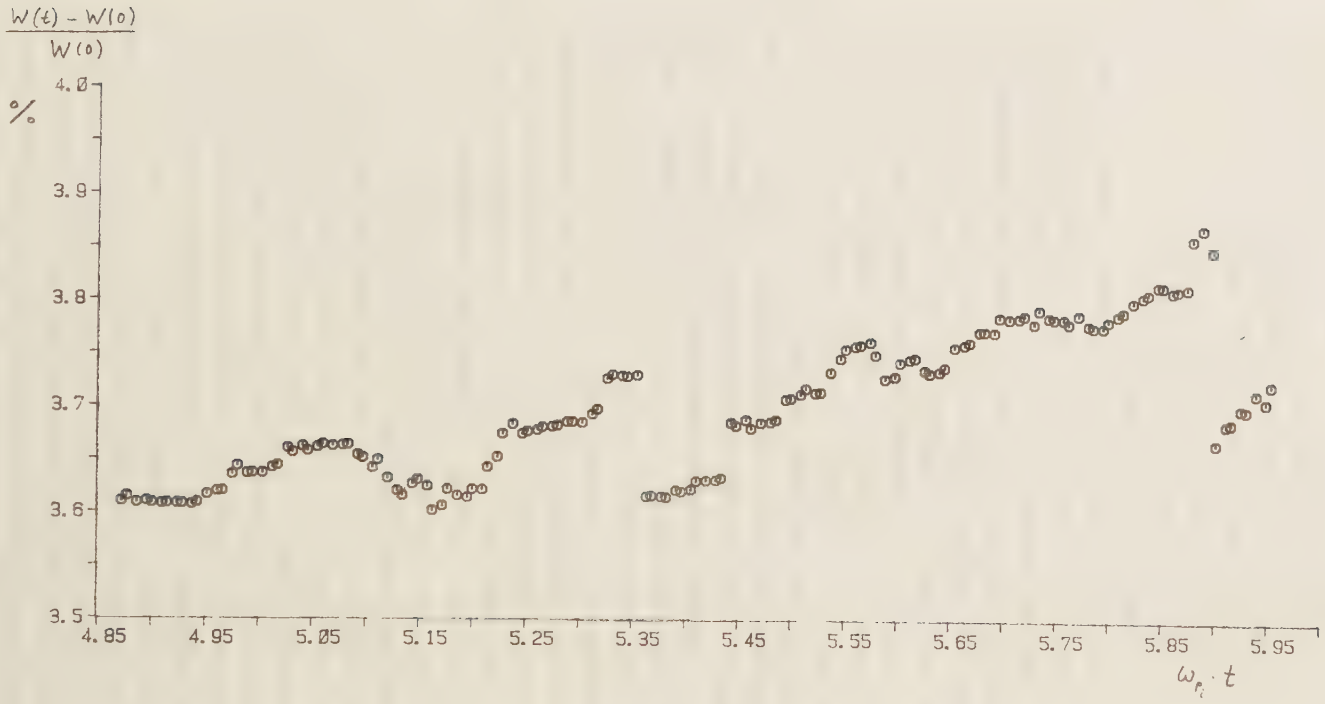


Abb. 3.14: Kurzzeit-Schwankungen der Gesamtenergie W bezogen auf die Anfangsenergie

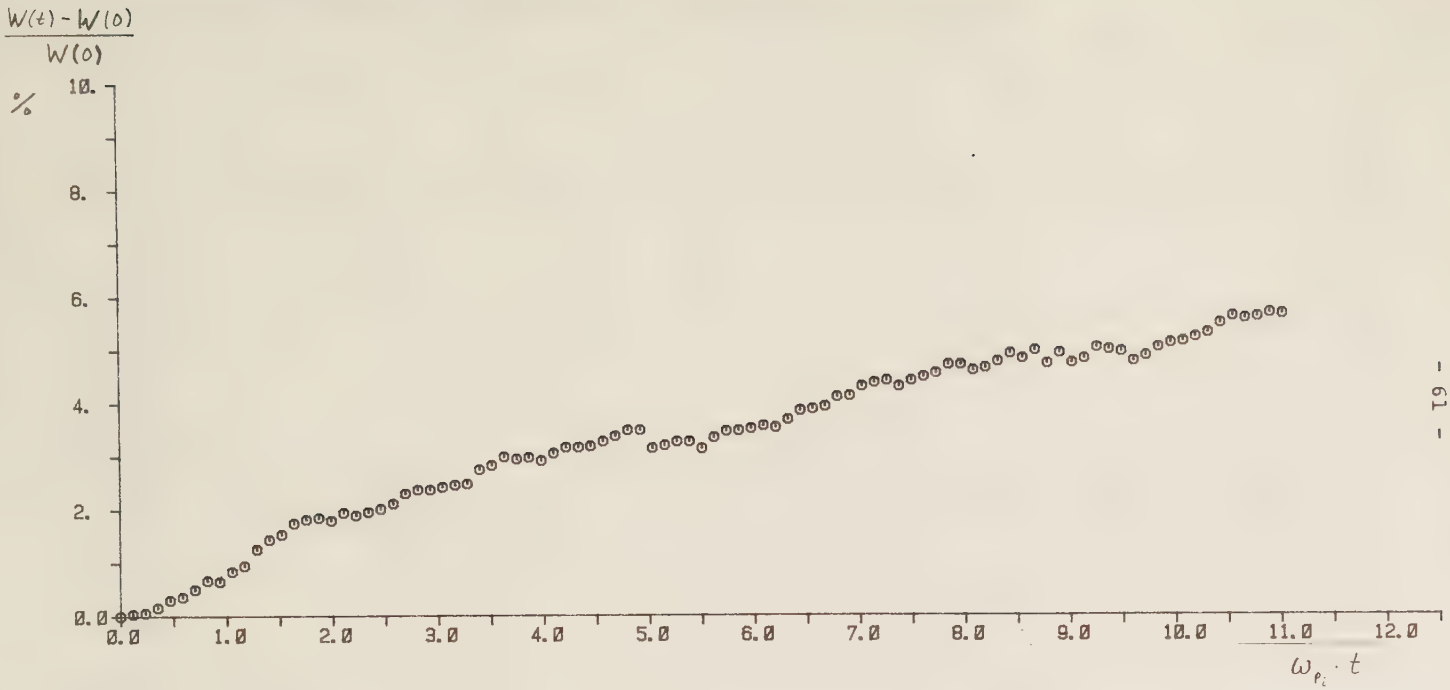


Abb. 3.15: Relative Gesamtenergie-Abweichung während der gesamten Simulationszeit

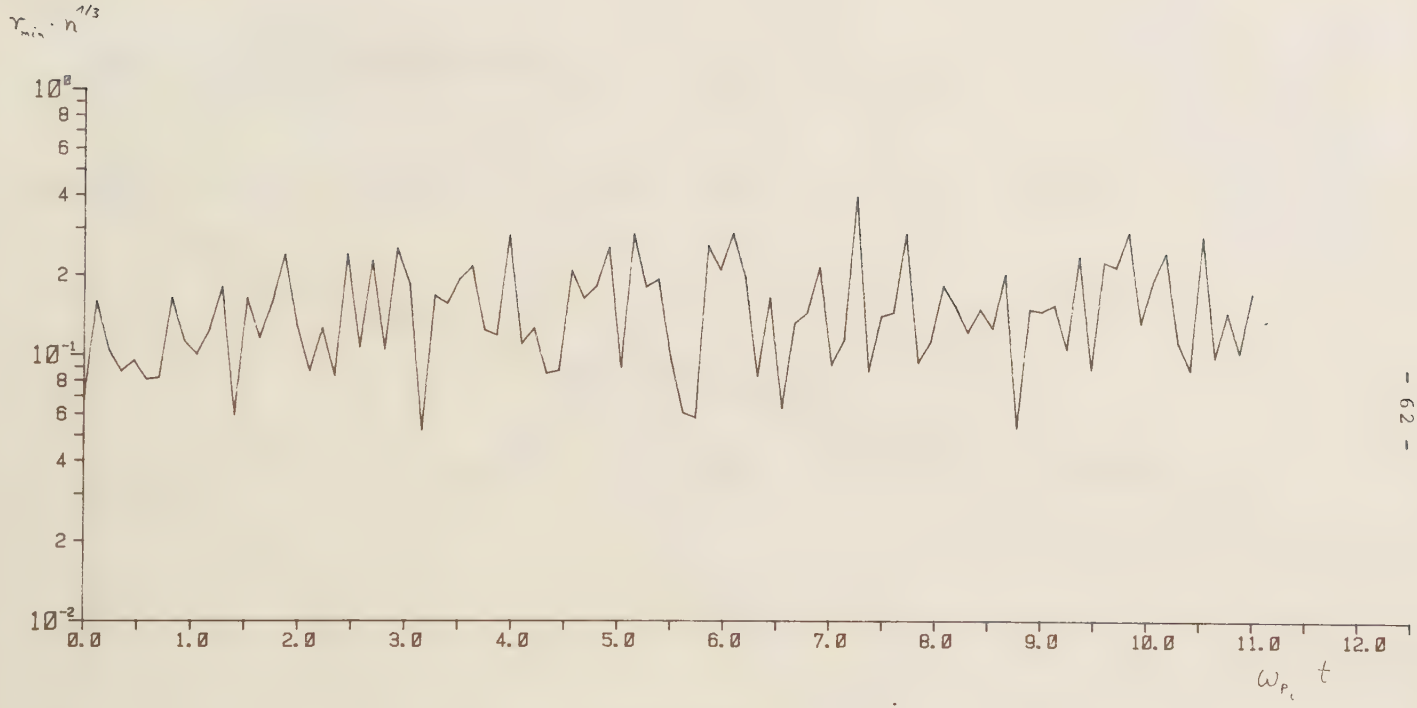


Abb. 3.16: Verlauf des auf den mittleren Teilchenabstand normierten, jeweiligen Minimalabstands zwischen je zwei Teilchen während der Simulationszeit.

Wie orientierende numerische Experimente zeigten, ist die mit einer "Wortlänge" von 60 bit erhöhte Genauigkeit dieser Rechenanlage zur Vermeidung zusätzlicher Rundungsfehler, die z.B. bei dem 48-bit-Rechner der hiesigen Universität auftreten, notwendig.

3.3.2 Auswertung und Vergleich mit der Theorie

Die mit der "molecular-dynamics"-Simulation erzeugten zeitabhängigen Mikrofelder werden zur Berechnung der Momente unter Ausschluß der Thermalisierungszeit erst über die Zeit und dann über die zehn unterschiedlichen Anfangskonfigurationen gemittelt. Beispielhaft für die gewonnenen Verteilungen, die wie bei der Monte-Carlo-Methode mit der "shifted-histogram"-Technik bestimmt werden, ist in Abb. 3.17 die Mikrofeldverteilung für N = 32 zusammen mit der durch die Monte-Carlo-Simulation gewonnenen Verteilung für die gleiche Teilchenzahl dargestellt. Wegen der geringen Zahl der simulierten Teilchen ist das Maximum dieser Funktion auch hier natürlich in Richtung auf die "nearest-neighbour"-Verteilung verschoben.

Die Berechnung der Momente der Verteilungen geschieht im Gegensatz zum Vorgehen bei der Monte-Carlo-Methode auf der Basis des Feldstärkenintervalls $\beta = 0, \ldots, \beta_M = 8$ (siehe auch Abschnitt 2.2.3), um übermäßige Schwankungen der Momente durch selten auftretende Extremwerte des Feldes zu vermeiden. Das Ergebnis ist in Abb. 3.18 in Abhängigkeit von der Teilchenzahl in halblogarithmischer Darstellung angegeben. Es ist zu sehen, daß diese Momente im untersuchten Teilchenzahlbereich einen ähnlichen Verlauf zeigen wie die ebenfalls eingezeichneten, durch die Monte-Carlo-Methode gewonnenen Momente (für das Intervall $\beta = 0, \ldots, \beta_M = 8$), d.h. ein Anwachsen von Median und Mittelwert und ein Absinken des Schiefewerts. Außerdem wird deutlich, daß bei den benutzten Teilchenzahlen Median und Mittelwert zwar etwas niedriger als bei der Monte-Carlo-Methode liegen, aber daß sich diese Werte mit zunehmendem N den entsprechenden Werten der Monte-Carlo-Simulationen anzunähern scheinen.

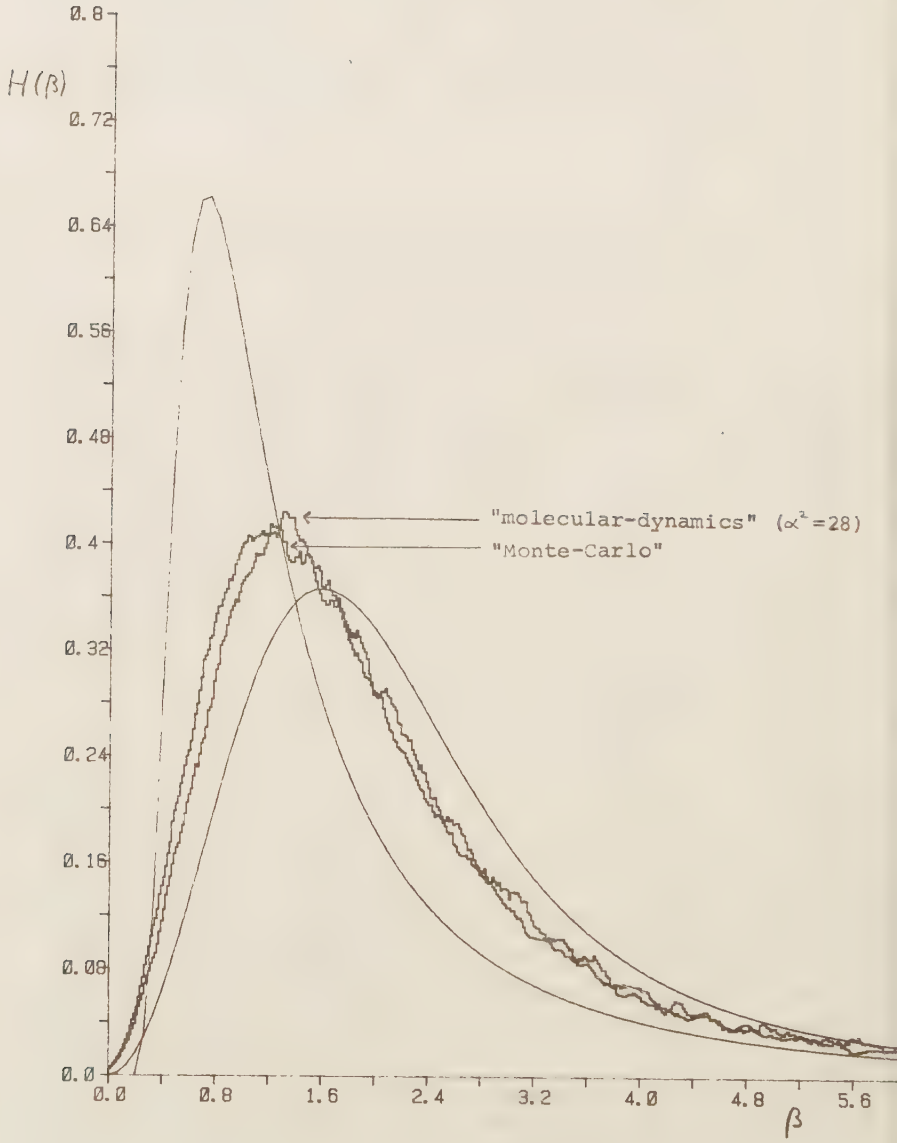


Abb. 3.17: Mikrofeldverteilung der mit N=32 Teilchen simulierten Systeme im Vergleich zur theoretischen "nearest-neighbour"- und Holtsmark-Verteilung

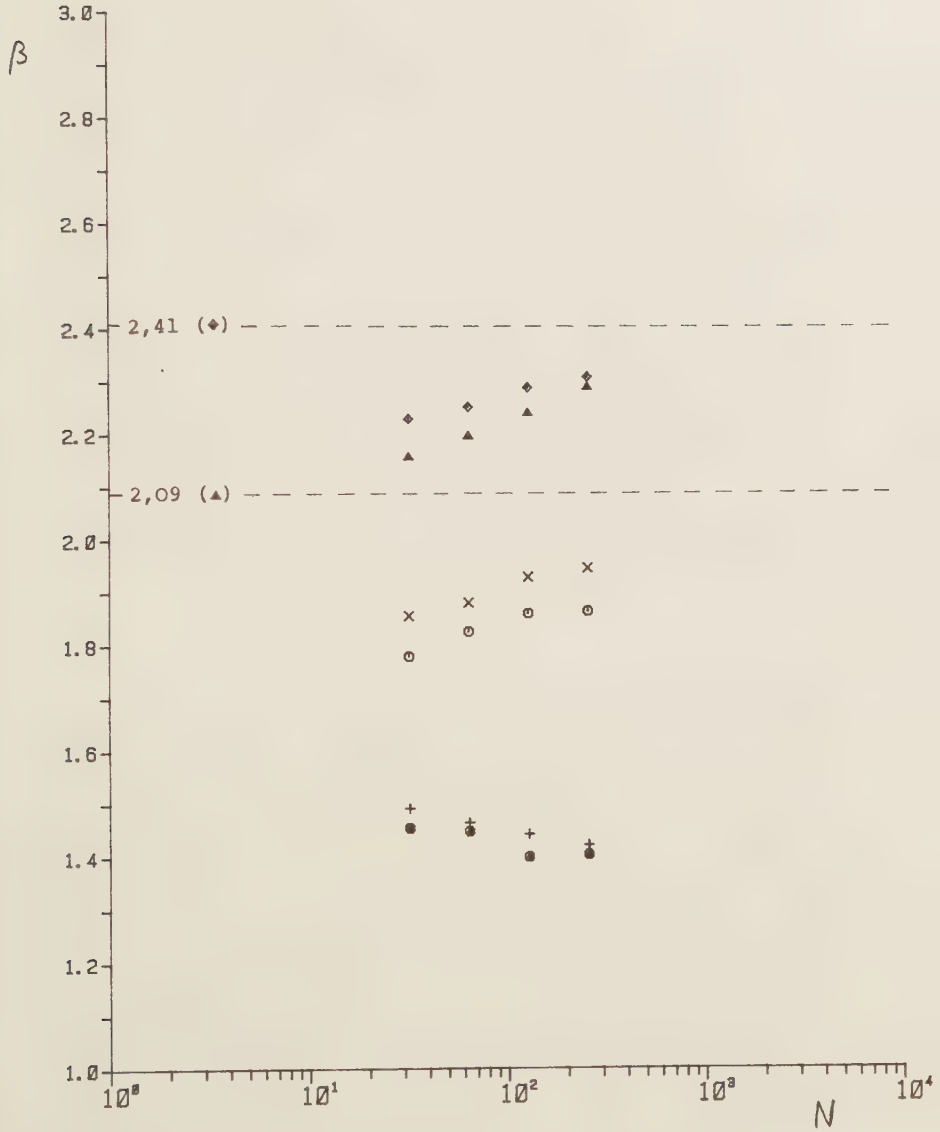


Abb. 3.18: Medianwert (⊙), Mittelwert (▲) und Schiefe (+) der Mikrofeldverteilung des simulierten Systems ($\alpha^2=28$) in Abhängigkeit von der Teilchenzahl N, verglichen mit den entsprechenden Werten (×, ◆ und ●) aus der Monte-Carlo-Simulation. Die nach Baranger-Mozer (▲) bzw. Holtsmark (◆) geltenden Mittelwerte für $N \to \infty$ sind gestrichelt.

3.3.3 Einfluß geänderter Simulationsbedingungen

Einfachere Simulationsmodelle ergeben sich durch Verzicht auf die Wechselwirkung, durch Gleichsetzung der Ionen- mit der Elektronenmasse oder durch die Kombination beider Möglichkeiten. Die erstgenannte Methode, die von Stamm und Voslamber /59/ bei einer Simulation der Spektrallinienverbreiterung benutzt wird, hat den Vorteil, daß sie ein zeitabhängiges Simulationsverfahren mit nur zu N proportionalem Rechenzeitaufwand darstellt.

Von den drei vereinfachten Verfahren sollen im folgenden nur die beiden erstgenannten zum Vergleich dienen, um den Einfluß der vollen Berücksichtigung der Coulomb-Wechselwirkung und des realen Massenverhältnisses deutlich zu machen /60/. Der dritte Fall ergibt sich aus dem ersten durch Betrachtung nur einer Plasmakomponente und durch entsprechende Zeitskalierung und braucht deshalb hier nicht näher behandelt werden.

Darüber hinaus wird die Abhängigkeit der Mikrofelder von den Randbedingungen untersucht.

3.3.3.1 Einfluß der Wechselwirkung

Wenn die Wechselwirkung zwischen den Teilchen völlig vernachlässigt wird, bewegen sich alle Teilchen mit konstanten Geschwindigkeiten auf geraden Bahnen, bis sie an den begrenzenden Wänden reflektiert werden. Wäre das simulierte System ergodisch, müßten die Momente der erzeugten Mikrofelder genau denen der Monte-Carlo-Methode entsprechen. Durch die ideale Reflexion an den Wänden und die endliche Anzahl der Teilchen sowie die endliche Simulationsdauer können jedoch nicht alle Punkte des Phasenraums erreicht werden. Das Ergebnis der Simulation zeigt, daß die Momente des Mikrofeldes (siehe Abb. 3.19) dennoch gut mit denen der Monte-Carlo-Simulation übereinstimmen.

Werden bei gleichen Plasmabedingungen zur Berechnung der Mikrofelder statt der Coulombfelder versuchsweise Debyefelder (siehe Gleichung 2.48) angenommen, wie Stamm und Voslamber /59/ sie benutzten, um bei den Ionen den Abschirmeffekt durch die Elektronen zu simulieren, dann ergeben sich durch die geringere Reichweite des elektrischen Feldes natürlich etwas

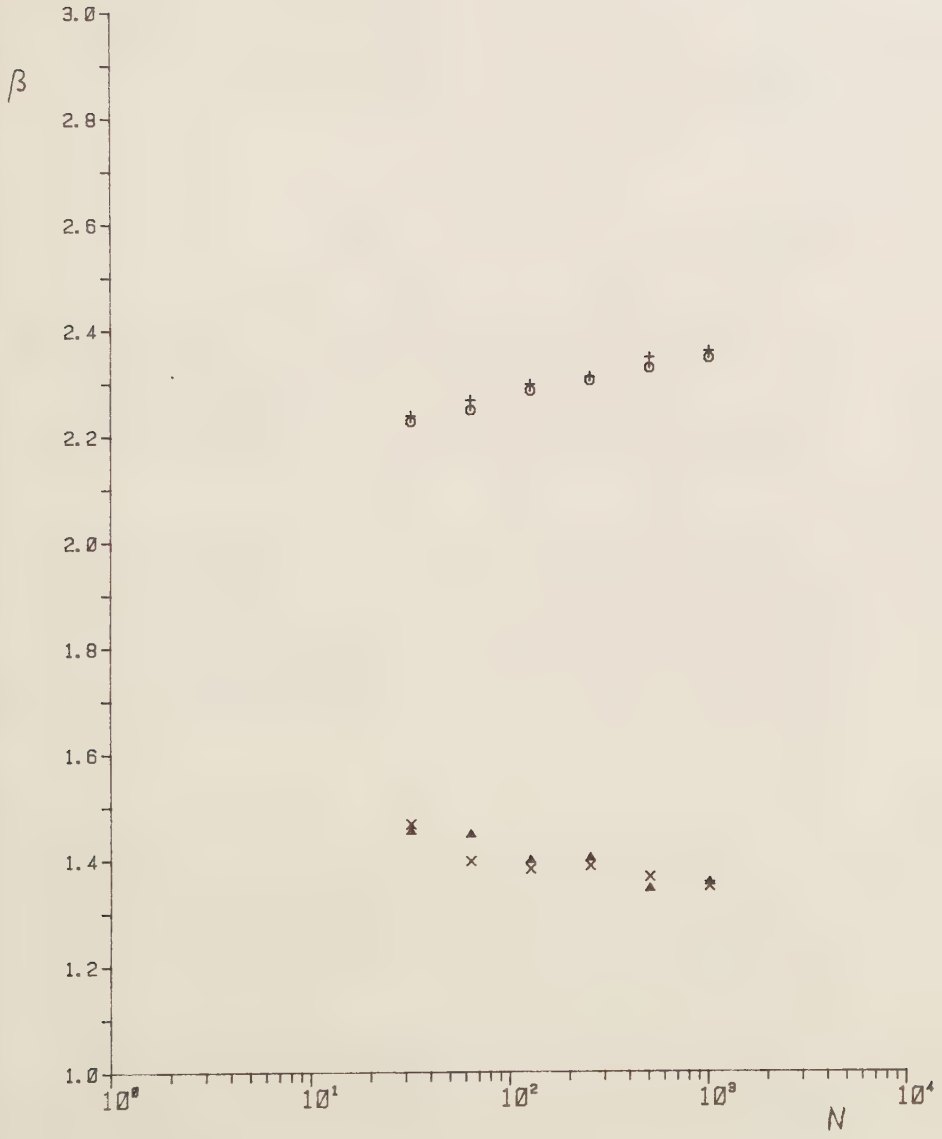


Abb. 3.19: Vergleich der Feldstärkenmittelwerte der Monte-Carlo- (⊙) und der "molecular-dynamics"-Methode ohne Wechselwirkung (+) sowie der Schiefewerte (▲ und ×) in Abhängigkeit von der Teilchenzahl N

niedrigere Feldmittelwerte und etwas höhere Schiefewerte der Feldverteilung. Diese Werte entsprechen im Rahmen der hier betrachteten relativ kleinen Teilchenzahlen etwa denen der ursprünglichen "molecular-dynamics"-Methode nach Abschnitt 3.3.2, wie in Abb. 3.20 zu sehen ist.

3.3.3.2 Einfluß des Massenverhältnisses

Die Komplizierung der Simulation durch die für Elektronen und Ionen unterschiedlichen Zeitskalen tritt nicht auf, wenn die Ionenmasse gleich der Elektronenmasse gesetzt wird, wie es bei den bisher veröffentlichten Simulationen zum Plasma-Mikrofeld geschah. Es wird dann ein Elektronen-Positronen-System simuliert, mit dem zusätzlichen Vorteil, daß zur Verbesserung der statistischen Sicherheit über beide Teilchensorten zusammen gemittelt werden kann.

Die Simulationen ergeben Mikrofeldverteilungen, deren Mittelwerte (siehe Abb. 3.21) offenbar systematisch etwas niedriger sind als bei den "molecular-dynamics"-Rechnungen mit Berücksichtigung des realen Massenverhältnisses 1/1836, wobei des weiteren die im Vergleich zu den vorangegangenen Simulationen schwächere Abhängigkeit der Momente von der Teilchenzahl auffällt.

3.3.3.3 Einfluß der Randbedingungen

Bei allen bisher beschriebenen Experimenten befinden sich die simulierten Teilchen in einem abgeschlossenen Volumen, um die mittlere Teilchendichte in diesem Volumen konstant zu halten. Die das Volumen umschließenden Wände sind als ideal reflektierend vorausgesetzt.

Ein anderes, oft (z.B. von Stamm und Voslamber /59/) benutztes Einschlußverfahren besteht in der Annahme "periodischer Randbedingungen", bei denen ein Teilchen, welches das Simulationsvolumen durch eine Wand verläßt, ohne Geschwindigkeitsänderung an der gegenüberliegenden Wand wieder in das System eintritt.

Weiterhin bietet sich die beispielsweise von Wilke /36/ benutzte diffuse Reflexion an den Gefäßwänden als Randbedingung an.

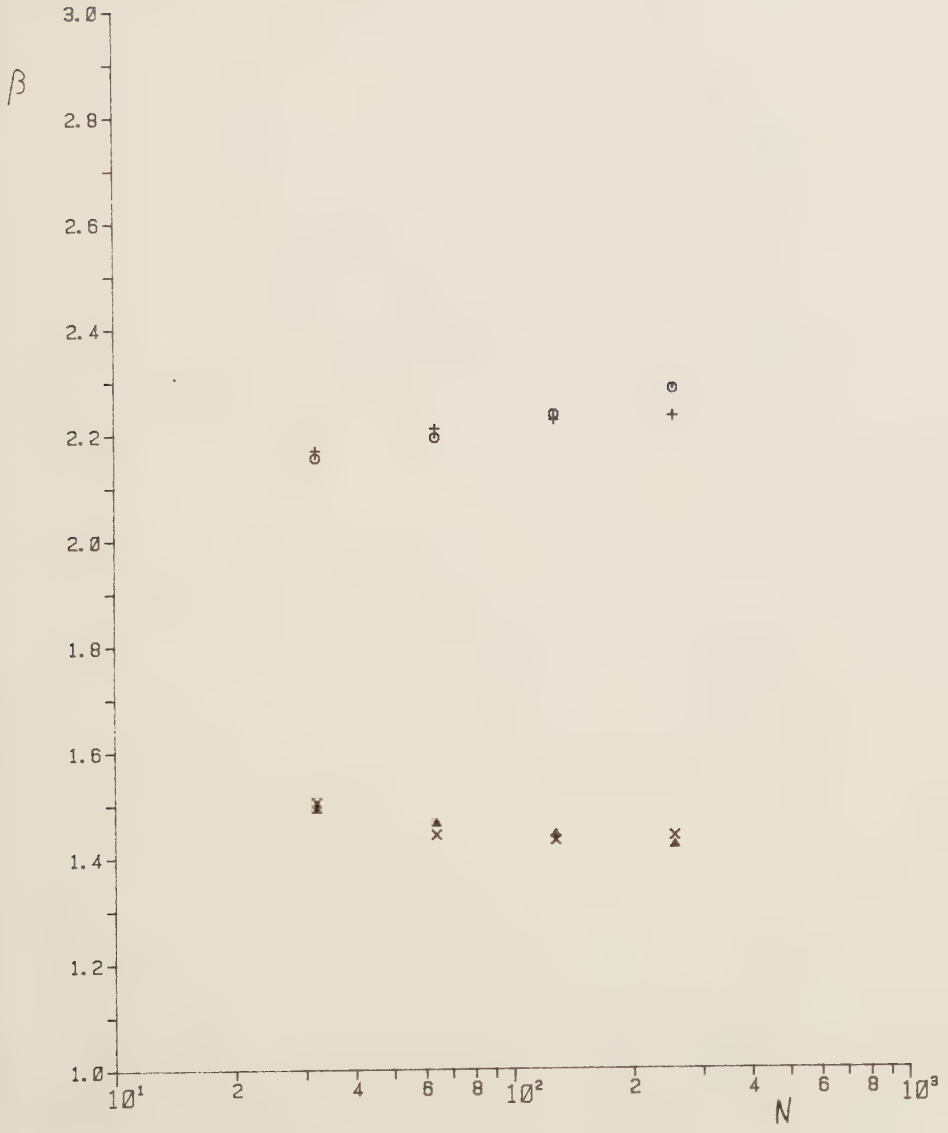


Abb. 3.20: Vergleich der Feldstärkenmittelwerte der "molecular-dynamics"-Methode mit Wechselwirkung (⊙) und ohne Wechselwirkung mit Debye-Feldern (+) sowie der Schiefewerte (▲ und x) in Abhängigkeit von der Teilchenzahl N

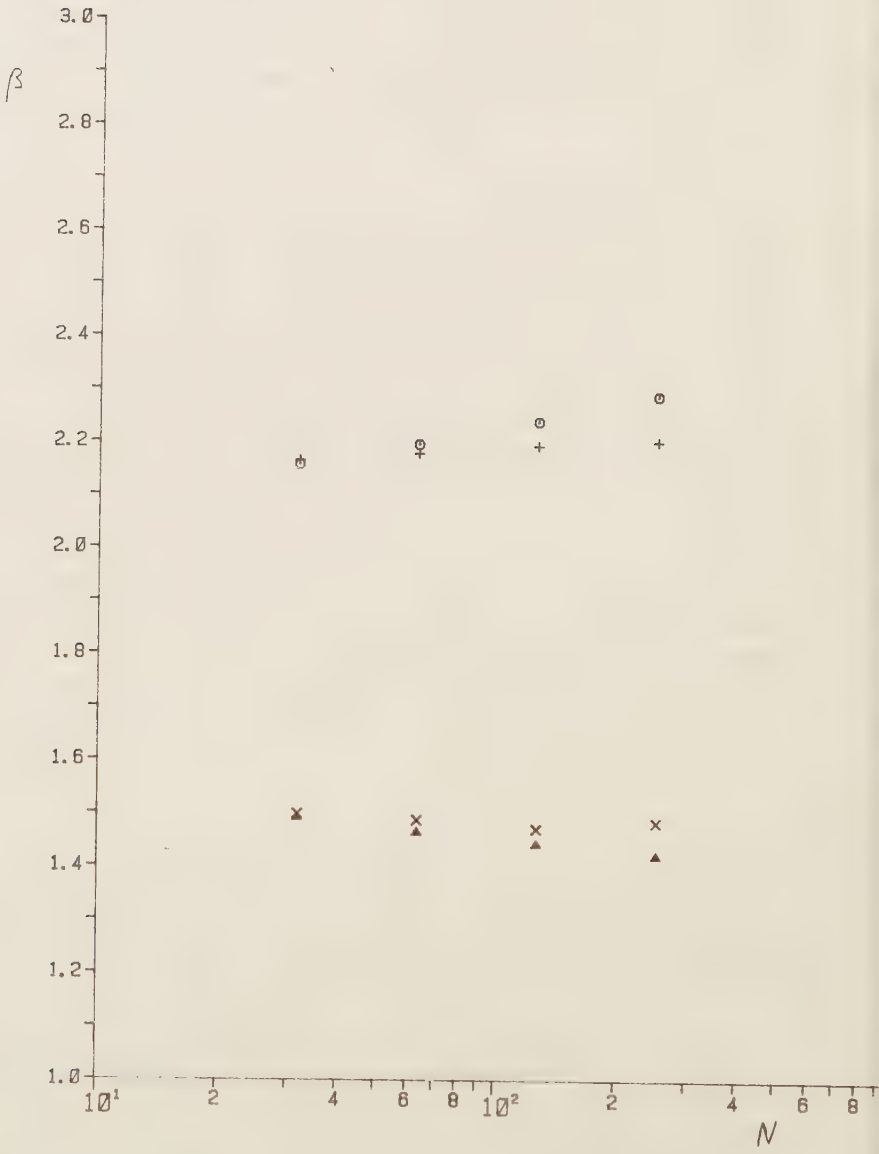


Abb. 3.21: Vergleich der Feldstärkenmittelwerte der "molecular-dynamics"-Methode mit realem Massenverhältnis (⊙) und mit $m_i = m_e$ (+) sowie der Schiefewerte (▲ und x) in Abhängigkeit von der Teilchenzahl N.

Zur Verdeutlichung des Einflusses der beiden erstgenannten Randbedingungen auf die Mikrofeldverteilung wird die "molecular-dynamics"-Simulation (zur Verminderung der Rechenzeit ohne Wechselwirkung zwischen den Teilchen) mit periodischen Randbedingungen wiederholt. In Abb. 3.22 ist der Mikrofeld-Mittelwert für die Simulation mit reflektierenden Randbedingungen mit dem bei periodischen Randbedingungen erhaltenen verglichen. Die Unterschiede sind so minimal und zeigen keine Systematik, daß sie im untersuchten Teilchenzahlbereich sicher zu vernachlässigen sind. (Man beachte hierbei die in Abb. 3.22 gegenüber den Abbildungen 3.18 bis 3.21 gedehnte Ordinatenskala.) Die genaue Form der an der Begrenzung zugrunde gelegten Bedingung ist daher nicht von Bedeutung, sobald die Teilchenzahl N groß gegen 1 ist.

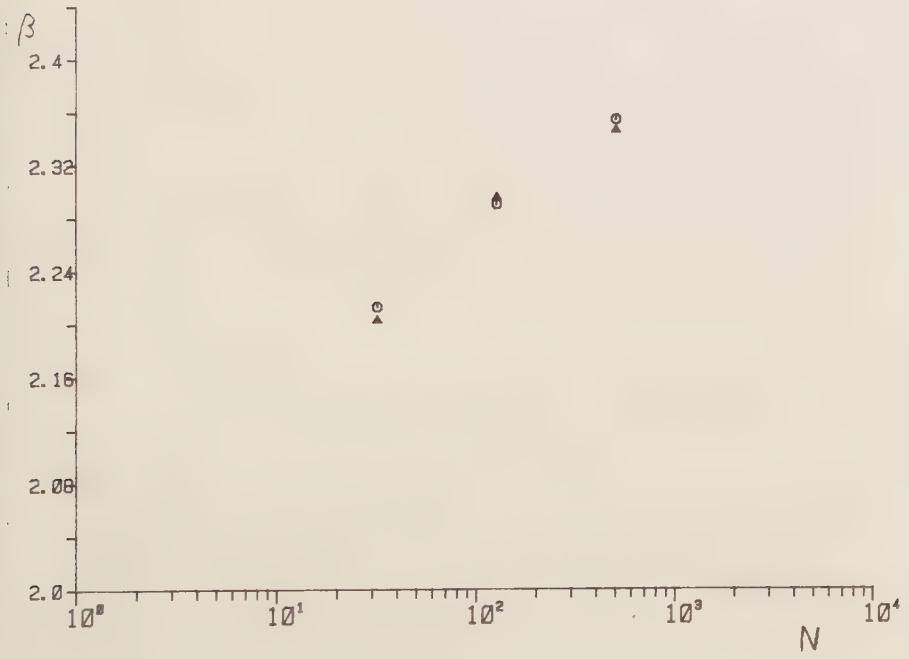


Abb. 3.22: Vergleich der Feldstärkenmittelwerte des mit reflektierenden Randbedingungen (⊙) und periodischen Randbedingungen (▲) simulierten Systems in Abhängigkeit von der Teilchenzahl N.

3.4 Erweiterung der "Molecular-Dynamics"-Simulation zur Bestimmung des Mikrofeldes an einem geladenen Aufpunkt

3.4.1 Beschreibung des Verfahrens

Zur Untersuchung des Mikrofeldes an einem geladenen Aufpunkt werden die im vorigen Kapitel beschriebenen "molecular-dynamics"-Computerexperimente dahingehend erweitert, daß sich eines der N/2 Ionen im Würfelmittelpunkt als unendlich schweres (also ruhendes) Teilchen befindet, welches mit allen übrigen Teilchen in Coulomb-Wechselwirkung steht. Wie bei den bisherigen Simulationen sollen auch hier die Teilchenzahlen N = 32, N = 64, N = 128 und N = 256 verwendet werden, und das simulierte Plasma soll bei gleichem Parameter $\alpha^2 = 28$ insgesamt wieder elektrisch neutral sein. Unter diesen Umständen können die Ergebnisse der jetzigen und der früheren Simulationen unmittelbar verglichen werden.

Die Rechnungen wurden ebenso wie die übrigen dynamischen Simulationen auf der Rechenanlage Cyber 76 des regionalen Rechenzentrums der Universität Köln durchgeführt, und es ergaben sich auch vergleichbare Rechenzeiten.

3.4.2 Auswertung und Vergleich mit der Theorie

Die zeitabhängigen Mikrofelder werden ausgewertet wie in Abschnitt 3.3.2 für die ursprüngliche "molecular-dynamics"-Methode beschrieben. Median, Mittelwert und Schiefe des experimentell ermittelten Mikrofeldes für die genannten Teilchenzahlen sind in Abb. 3.23 dargestellt; in Abb. 3.24 werden die Feldmittelwerte für einen geladenen und einen ungeladenen Aufpunkt miteinander verglichen. Die theoretischen Werte nach Baranger und Mozer (siehe Abschnitt 2.5) sind eingetragen. Es wird deutlich, daß diese Theorie (und ebenfalls die Theorie nach Hooper /14/) den Unterschied zwischen einem besetzten und einem unbesetzten Aufpunkt deutlich überschätzt. Wie sich

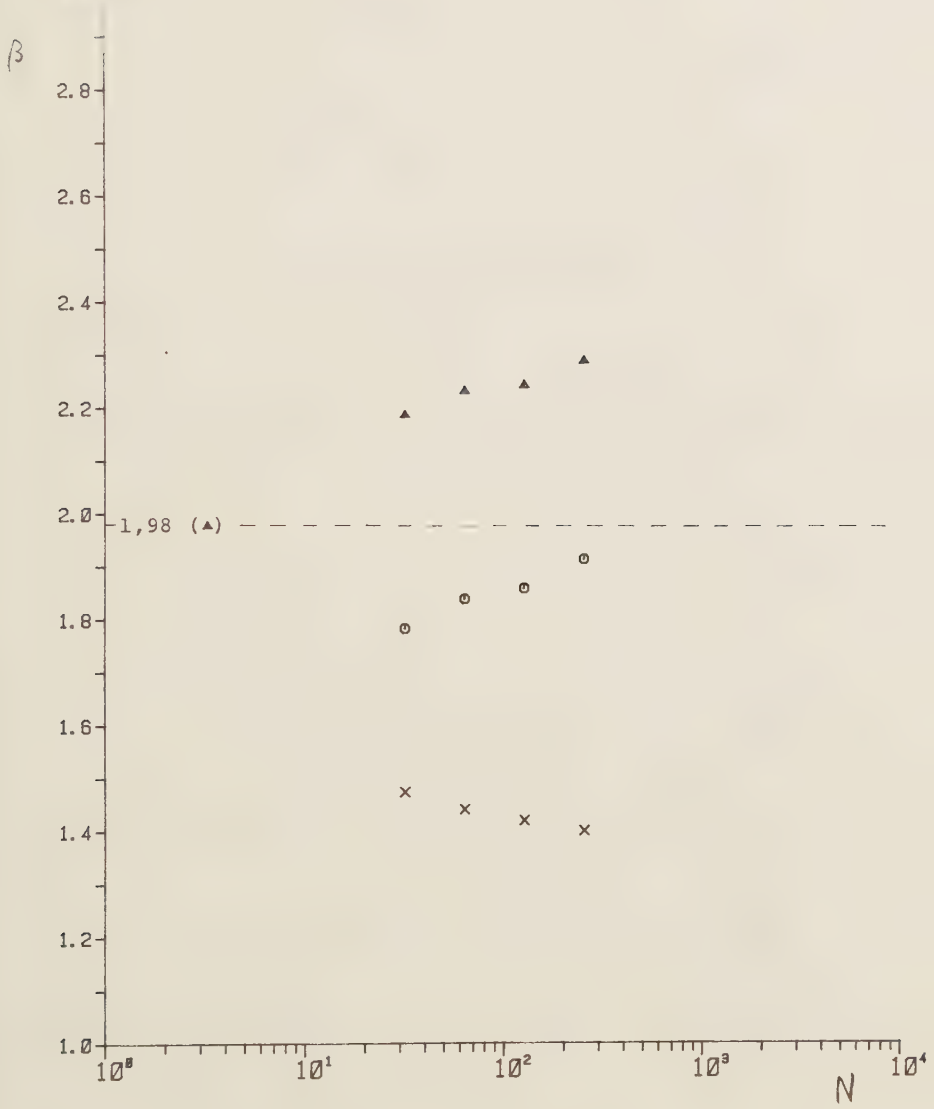


Abb. 3.23: Medianwert (⊙), Mittelwert (▲) und Schiefe (x) der Mikrofeldverteilung am Ort eines Ions in Abhängigkeit von der Teilchenzahl N. Gestrichelt ist der nach Baranger-Mozer geltende Mittelwert für $N \to \infty$.

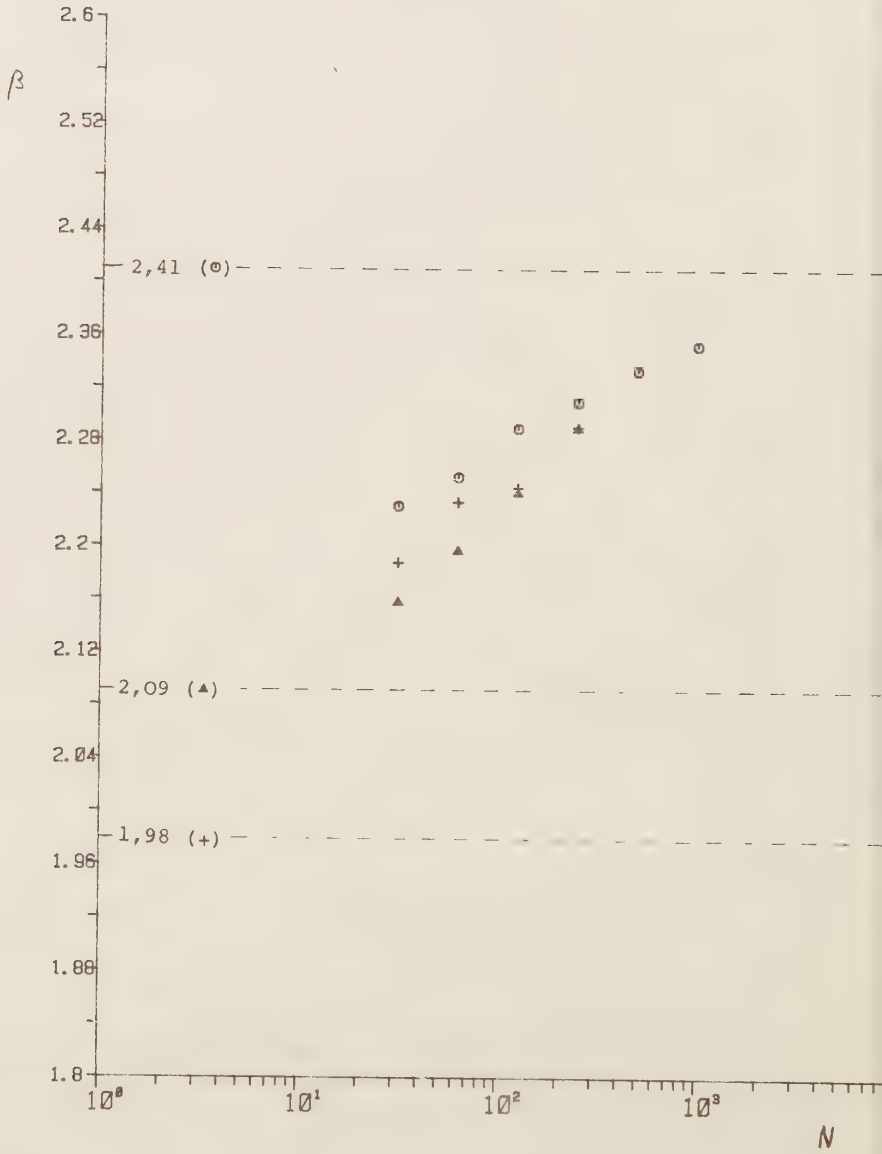


Abb. 3.24: Vergleich der Feldstärkenmittelwerte nach der Monte-Carlo-Methode (⊙) sowie nach der "molecular-dynamics"-Methode an einem neutralen Aufpunkt (▲) und am Ort eines Ions (+) in Abhängigkeit von der Teilchenzahl N. Die Werte nach Holtsmark (⊙) sowie nach Baranger-Mozer (▲ und +) für $N \to \infty$ sind gestrichelt.

zeigt, ist die Differenz der Mikrofelder an einem geladenen und an einem ungeladenen Aufpunkt nur gering, so wie es die Theorie der kollektiven Felder nach Hunger und Larenz fordert. Obwohl letztere Theorie nur für $\alpha^2 \gg 1$ gelten soll und bei den geringen Teilchenzahlen noch keine Fernfeldbeiträge (vgl. die Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulationen in Abschnitt 3.1.2) zu erwarten sind, ist bei den Simulationsdaten ($\alpha^2 = 28$, $N \leq 256$) schon der entsprechende Trend sehr deutlich festzustellen.

Auch das von Baranger und Mozer berechnete zweite Moment $\langle \beta^2 \rangle$ wird schon bei den hier benutzten geringen Teilchenzahlen unterschritten. Nach Gleichung 2.89 sollte für die Simulationsdaten $\langle \beta^2 \rangle \approx 100$ gelten, experimentell ergibt sich aber $\langle \beta^2 \rangle \approx 10 \ldots 50$ (für $N = 256, \ldots, 32$), d.h. selbst die bei diesen geringen Teilchenzahlen tatsächlich auftretenden Felder scheinen weit weniger "Holtsmark-artig" zu sein als nach den Theorien von Hooper oder von Baranger und Mozer gefordert wird.

Zusammenfassend läßt sich angesichts der Ergebnisse in Abb. 3.24 für alle Experimente unter mehr oder weniger vollständiger Berücksichtigung der Zeitentwicklung eines N-Teilchen-Plasmas feststellen, daß die gewonnenen Mittelwerte der Feldstärke deutlich höher ausfallen als die Holtsmark-ähnlichen Theorien nach Abschnitt 2.3 fordern. Weiterhin zeigt sich, daß das zweite Moment der Feldstärkenverteilung ebenso wie höhere Momente, wofür repräsentativ durchweg die "Schiefe" angegeben wurde, mit zunehmender Teilchenzahl im Bereich der hier der Untersuchung zugänglichen Teilchenzahlen bis N = 256 abnehmende Tendenz aufweist. Das bedeutet, daß sich auch schon bei diesen im Vergleich zu den Monte-Carlo-Experimenten kleinen Teilchenzahlen eine Tendenz des Übergangs von der "Holtsmark-artigen" zur "Gauß-artigen" Verteilung nach Abschnitt 2.4 abzeichnet.

Kapitel 4

Die zeitliche Autokorrelationsfunktion des Mikrofeldes

Die Kenntnis der mittleren zeitlichen Autokorrelationsfunktion des Plasma-Mikrofeldes ist in der Theorie der Spektrallinienverbreiterung und zur Berechnung der Transportkoeffizienten von Bedeutung.

Eine normierte, dimensionslose bedingte Mikrofeld-Autokorrelationsfunktion kann durch

$$K(t|E_1) = \frac{\langle \vec{E}(t+\tau)\cdot\vec{E}(\tau)\cdot\delta(\vec{E}_1-\vec{E}(\tau))\rangle}{\langle|\vec{E}(\tau)|^2\cdot\delta(\vec{E}_1-\vec{E}(\tau))\rangle} \tag{4.1}$$

definiert werden; es gilt dann $K(t=0|E_1) = 1$. Strenggenommen hängt die rechte Seite auch vom Anfangszeitpunkt τ und von der Richtung des festgewählten Anfangsfeldes $\vec{E}_1$ ab. Diese Abhängigkeit entfällt jedoch für stationäres, isotropes $\vec{E}(t)$.

Die (unbedingte) normierte mittlere Autokorrelationsfunktion, die $K(t|E_1)$ entspricht, ergibt sich durch Mittelung über $\vec{E}_1$ gemäß $W(\vec{E}_1)$:

$$K_1(t) = \int K(t|E_1)W(\vec{E}_1)\,d\vec{E}_1 \tag{4.2}$$

$$= \int \frac{\langle \vec{E}(t+\tau)\cdot\vec{E}(\tau)\,\delta(\vec{E}_1-\vec{E}(\tau))\rangle}{\vec{E}_1^2}\,d\vec{E}_1$$

Eine andere normierte Autokorrelationsfunktions kann man durch

$$K_2(t) = \frac{\int\langle \vec{E}(t+\tau)\cdot\vec{E}(\tau)\cdot\delta(\vec{E}_1-\vec{E}(\tau))\rangle W(\vec{E}_1)\,d\vec{E}_1}{\int\langle|\vec{E}(t)|^2\cdot\delta(\vec{E}_1-\vec{E}(\tau))\rangle W(\vec{E}_1)\,d\vec{E}_1} \tag{4.3}$$

definieren. Da in dieser Definition im Nenner das zweite Moment der Mikrofeldverteilung steht, ist der Ausdruck beispielsweise für die Holtsmark-Verteilung nicht definiert; es

verbleibt dann nur die Möglichkeit gemäß Gleichung 4.2. Welche der beiden Möglichkeiten für weitere Zwecke herangezogen wird, hängt dann eben von diesem Anwendungszweck ab.

4.1 Theoretische Ansätze

Chandrasekhar und von Neumann berechnen in ihrer vielzitierten Aufsatzfolge /61/ für das Gravitationsfeld einer Sternverteilung die bedingte Autokorrelationsfunktion an einem unbesetzten Aufpunkt unter Voraussetzung einer Holtsmark-Verteilung H(ß) (siehe Abschnitt 2.2.1) für die Felder und einer Maxwell-Verteilung für die Geschwindigkeiten zu

$$K_{CH}(\tilde{t},\beta) = \frac{15}{2\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{1}{\beta^{5/2} H(\beta)} \int_0^\infty x^2 e^{-\left(\frac{x}{\beta}\right)^{3/2}} \cdot J_{3/2}(x) \cdot \tilde{\tilde{Q}}\left(\frac{x}{\tilde{t}^2\beta}\right) dx \tag{4.4}$$

mit

$$\tilde{\tilde{Q}}(y) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \lambda^2 e^{-\lambda^2} Q\left(\frac{y}{\lambda^2}\right) d\lambda \tag{4.5}$$

und

$$Q(x) = \frac{1}{5}\left[4 \cdot C_2(x) - \frac{1}{x} J_{3/2}(x) - 2 \cdot J_{1/2}(x)\right]. \tag{4.6}$$

Darin sind $C_2(x)$ das Fresnelsche cos-Integral /44/

$$C_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^x \frac{\cos t}{t^{1/2}}\, dt \tag{4.7}$$

und $J_{n+1/2}(x)$ sphärische Besselfunktionen /44/

$$J_{n+1/2}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot x^{n+1/2} \left[-\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right]^n \frac{\sin x}{x}. \tag{4.8}$$

Die normierten Variablen sind gegeben durch

$$\tilde{t} = 2\left[\frac{4}{15}\right]^{1/3} \left[\frac{\pi}{3}\right]^{1/2} n^{1/3} v_{RMS}\, t \tag{4.9}$$

und

$$\tilde{v} = \sqrt{\frac{3}{2}} \cdot \frac{v}{v_{RMS}} \tag{4.10}$$

mit

$$v_{RMS} = \langle v^2 \rangle^{1/2} \tag{4.11}$$

sowie die reduzierte Feldstärke ß nach Gleichung 2.36.

Die Mittelung über die Feldstärken gemäß der Holtsmark-Verteilung, die aufgrund des Ansatzes die einzige dafür sinnvolle Verteilung darstellt, ist nicht geschlossen durchführbar. Die

numerische Rechnung liefert für den gemäß Gleichung 4.2 gemittelten Ausdruck

$$V_{CH}(t) = \frac{15}{2\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty \int_0^\infty x^2 e^{-\left(\frac{x}{\beta}\right)^{3/2}} \gamma_{3/2}(x)\, \tilde{Q}\left(\frac{x}{t^2\beta}\right) \beta^{-5/2}\, d\beta\, dx \qquad (4.12)$$

eine der in Abb. 4.1 dargestellten Kurven. In dieser Abbildung sind ferner drei bedingte Autokorrelationsfunktionen nach Gleichung 4.4 für etwa um den Faktor 3 gegenüber der mittleren Feldstärke unterschiedliche Feldstärkenwerte eingetragen. Da die Feldstärkenabhängigkeit hiernach ersichtlich nicht sehr stark ist, führen die beiden Mittelungsvorschriften gemäß Gleichung 4.2 und 4.3 zu nicht merklich verschiedenen Ergebnissen für die mittlere Autokorrelationsfunktion, sofern das zweite Feldstärkenmoment existiert.

Die Entwicklungen von Gleichung 4.12 für Zeiten $t \to 0$ bzw. $t \to \infty$ lauten:

$$K_{CH}(t) \simeq 1 - C_1 \left(\frac{t}{\tau_{CH}}\right)^5 \qquad (4.13)$$

bzw.

$$K_{CH}(t) \simeq C_2 \left(\frac{\tau_{CH}}{t}\right) \qquad (4.14)$$

mit

$$\tau_{CH} = n^{-1/3} \sqrt{\frac{m}{k_B T}}\,. \qquad (4.15)$$

Chandrasekhar wies schon auf den "langsamen" t^{-1}-Abfall dieser Funktion für Zeiten $t \gg \tau_{CH}$ hin.

Cohen, Spitzer und Routly /62/ berechnen einige Jahre später eine über die Anfangsfelder $\vec{E}_i$ gemittelte, nicht dimensionslose Autokorrelationfunktion (entsprechend dem Zähler in Gleichung 4.3) zu

$$C_{CSR}(t) = \langle \vec{E}(t) \cdot \vec{E}(0) \rangle = 4\sqrt{2\pi}\, e_0^2\, n^{4/3} \left(\frac{\tau_{CSR}}{t}\right) \qquad (4.16)$$

mit

$$\tau_{CSR} = \tau_{CH}\,. \qquad (4.17)$$

Dies gilt allerdings nur für Zeiten $t \gg \tau_{CH}$, weil für $t \to 0$ eine unphysikalische Divergenz auftritt, die der Divergenz des zweiten Moments $\langle \vec{E}(0) \cdot \vec{E}(0) \rangle$ entspricht. Auch eine genauere Rechnung von Fidone /63/, der eine Entwicklung ähnlich wie Baranger und Mozer (siehe Abschnitt 2.3) durchführt, behebt diese Divergenz nicht.

Erst Hunger und Larenz geben in /20/ eine physikalisch sinnvollere, gemäß Gleichung 4.3 über $\vec{E}_i$ gemittelte Korrelationsfunktion an, welche nach Wilke /36/ unter Fortlassung des in diesem Fall klar definierten Nenners (siehe Abschnitt 2.4) in guter Näherung lautet:

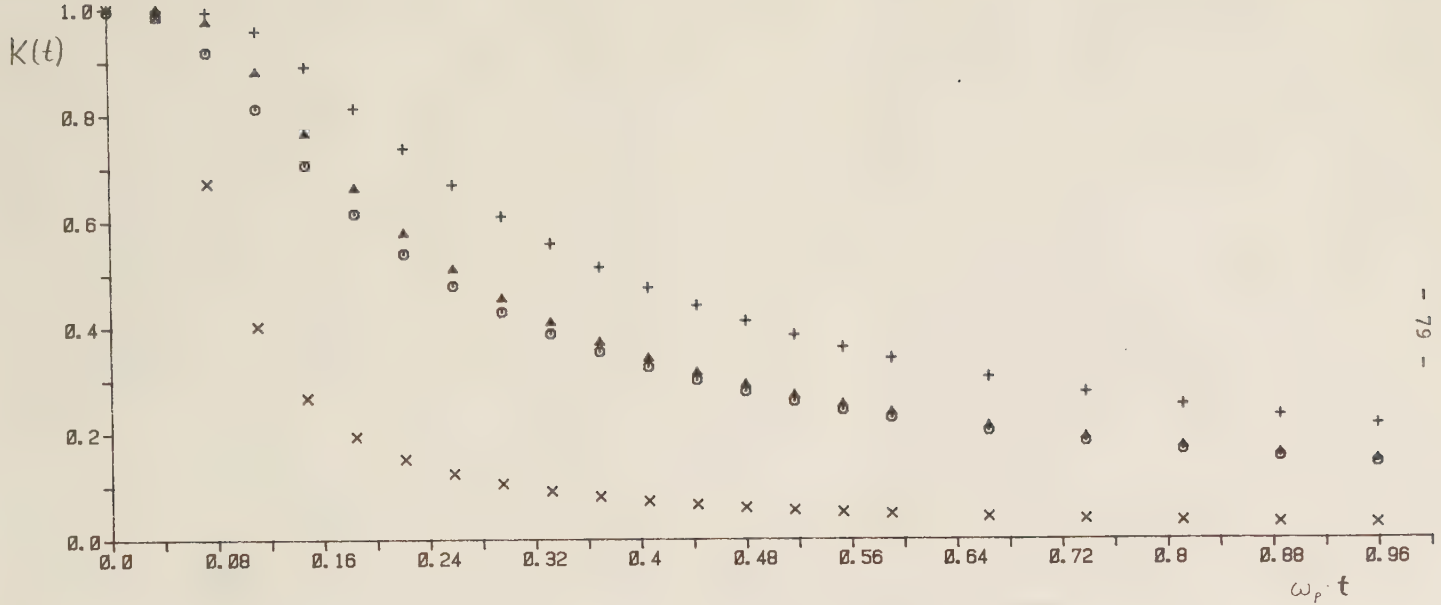


Abb. 4.1: Mikrofeld-Autokorrelationsfunktionen nach Chandrasekhar (für den Fall $\alpha^2=30$)
▲ für die normierte Anfangsfeldstärke $\beta_M=2,40$
+ für die normierte Anfangsfeldstärke $\beta_K=0,60$
× für die normierte Anfangsfeldstärke $\beta_G=6,50$
⊙ gemittelt über alle Anfangsfeldstärken ($\langle\beta\rangle=3,41$)

(4.18) $$C_{HL}(t) = \left\langle \vec{E}(t) \cdot \vec{E}(0) \right\rangle = \gamma \, 4\pi \, \theta_0^2 \, n^{4/3} \cdot \left[1 + \left(\frac{t}{\tau_{HL}}\right)^2\right]^{-1/2}$$

mit

(4.19) $$\tau_{HL} = \gamma^{-1} \cdot \tau_{CH}$$

und mit $\gamma = \mathcal{O}(10)$ für die in dieser Arbeit verwendeten Simulationsbedingungen ($\alpha^2 = 28$).

Während die von Chandrasekhar und v. Neumann berechnete Autokorrelationsfunktion für Zeiten $t \to 0$ eine sehr schwache Zeitabhängigkeit besitzt, weist die Autokorrelationsfunktion nach Wilke eine quadratische Zeitabhängigkeit auf, wie es physikalisch sein muß, denn der Koeffizient zu t^2 ist durch das zweite Moment des Feldstärkenfrequenzspektrums gegeben.

Für Zeiten $t \to \infty$ klingen die entsprechenden Korrelationsfunktionen sowohl nach Chandrasekhar (Gleichung 4.12) als auch nach Hunger-Larenz (Gleichung 4.18) wie die Spitzersche Korrelationsfunktion (Gleichung 4.16) proportional zu t^{-1} ab (siehe Abb. 4.2).

4.2 Auswertung der Simulationsdaten

Die mit der "molecular-dynamics"-Methode nach Abschnitt 3.3 gewonnenen zeitabhängigen Mikrofelddaten werden auch zur Bestimmung der zeitlichen Autokorrelationsfunktion benutzt.

Für feste Zeitpunkte $t_0 = m \cdot \tilde{\Delta t}$ wird für 64 frühere und 64 spätere Zeiten $t_j = t_0 + j \cdot \tilde{\Delta t}$ ($j = -64, \ldots, 0, \ldots, 64$) die Autokorrelationsfunktion (im Sinne von Gleichung 4.2)

(4.20) $$K(j \cdot \tilde{\Delta t}) = \frac{1}{M-j} \sum_{m=1}^{M-j} \frac{\vec{E}(m \cdot \tilde{\Delta t}) \cdot \vec{E}(m \cdot \tilde{\Delta t})}{|\vec{E}(m \cdot \tilde{\Delta t})|^2}$$

(M = Anzahl der Zeitpunkte pro Simulation)
getrennt nach Elekronen- und Ionenbeitrag berechnet. Die Schrittweite $\tilde{\Delta t}$ entspricht für die Elektronenkomponente den Aufzeichnungszeitabständen δt (siehe Abschnitt 3.3.1), während für die Ionenkomponente wegen der geringeren Geschwindigkeiten größeren Zeitabstände gewählt werden können (siehe unten). Dies wird für alle zehn Experimente pro Teilchenzahl durchgeführt, und anschließend wird der Mittelwert aus den einzelnen Korrelationsfunktionen gebildet. Aufgrund der zeitlichen Symmetrie der gemittelten Autokorrelationsfunktion - welche die ausgewerteten Daten infolge der endlichen Zeitdauer der Expe-

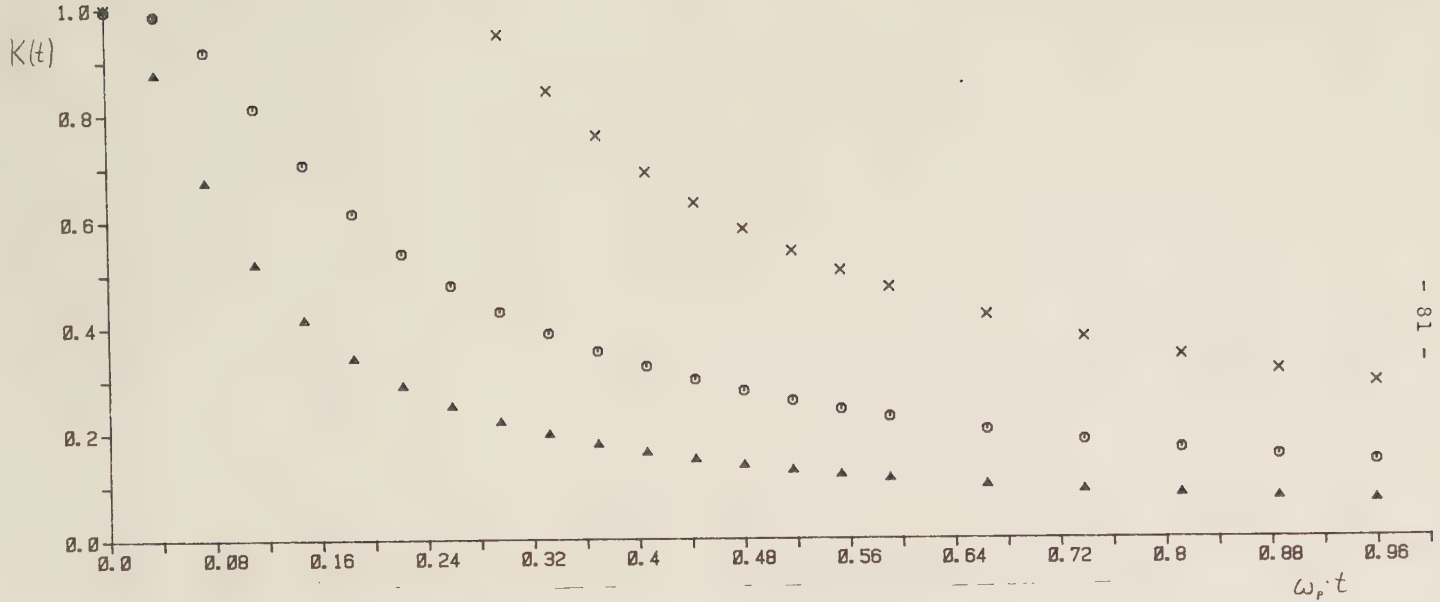


Abb. 4.2: Gemittelte Mikrofeld-Autokorrelationsfunktionen (für $\alpha^2=30$) nach
⊙ Chandrasekhar (Mittelungsvorschrift nach Gl. 4.2)
▲ Hunger und Larenz
× Spitzer
} (Mittelungsvorschrift nach Gl. 4.3)

rimente natürlich nur näherungsweise erfüllen - wird außerdem noch über die beiden positiven und negativen j-Werte gleichen Betrags gemittelt.

Zusätzlich wird die Auswertung nach unterschiedlichen Anfangsfeldstärken getrennt durchgeführt, um die in Gleichung 4.1 angegebene bedingte Autokorrelationsfunktion zu bestimmen. Dabei wird wieder das oben beschriebene Verfahren angewandt, aber die Einordnung in die 129 Kanäle wird in Abhängigkeit von der Feldstärke $|\vec{E}(t_o)|$ so vorgenommen, daß der gesamte Feldstärkenbereich in acht Intervalle unterteilt wird, die für optimale Genauigkeit empirisch so gewählt sind, daß sie etwa die gleichen Belegungszahlen enthalten.

Für die Elektronenkomponente der bedingten Autokorrelationsfunktion besteht aufgrund der für diese Untersuchungen zur Verfügung stehenden Rechenzeit schon zufriedenstellende statistische Sicherheit, während dies für die Ionenkomponente noch nicht in vollem Umfang der Fall ist, jedoch kann die mittlere Ionen-Autokorrelationsfunktion ausgewertet werden. Als charakteristische Beispiele für die experimentell ermittelten bedingten Autokorrelationsfunktionen sind in Abb. 4.3 drei dieser Funktionen mit etwa um den Faktor 3 gegenüber der mittleren Feldstärke unterschiedlichen Anfangsfeldstärken zusammen mit der gemäß Gleichung 4.2 über die Anfangsfeldstärken gemittelten Funktion dargestellt.

4.3 Vergleich mit der Theorie

Bei entsprechender Zeitskalierung mit den Plasmafrequenzen (Elektronenkomponente mit ω_p^{-1}, Ionenkomponente mit $\omega_{p_i}^{-1}$) zeigen beide Komponenten der mittleren Autokorrelationsfunktion den gleichen funktionalen Verlauf /64/, wie es auch theoretisch sein sollte. Wie in Abb. 4.3 zu sehen ist, halten sich kleine Feldstärken länger als mittlere Feldstärken, und hohe Feldstärken fallen schneller ab. Für Zeiten $t \to \infty$ (am rechten Bildrand) scheinen alle Autokorrelationsfunktionen schneller als wie das von der Theorie geforderte asymptotische Verhalten gegen Null zu gehen (siehe unten).

Um die Abhängigkeiten der Autokorrelationsfunktion von der Teilchenzahl und von den Anfangsfeldstärken zu verdeutlichen,

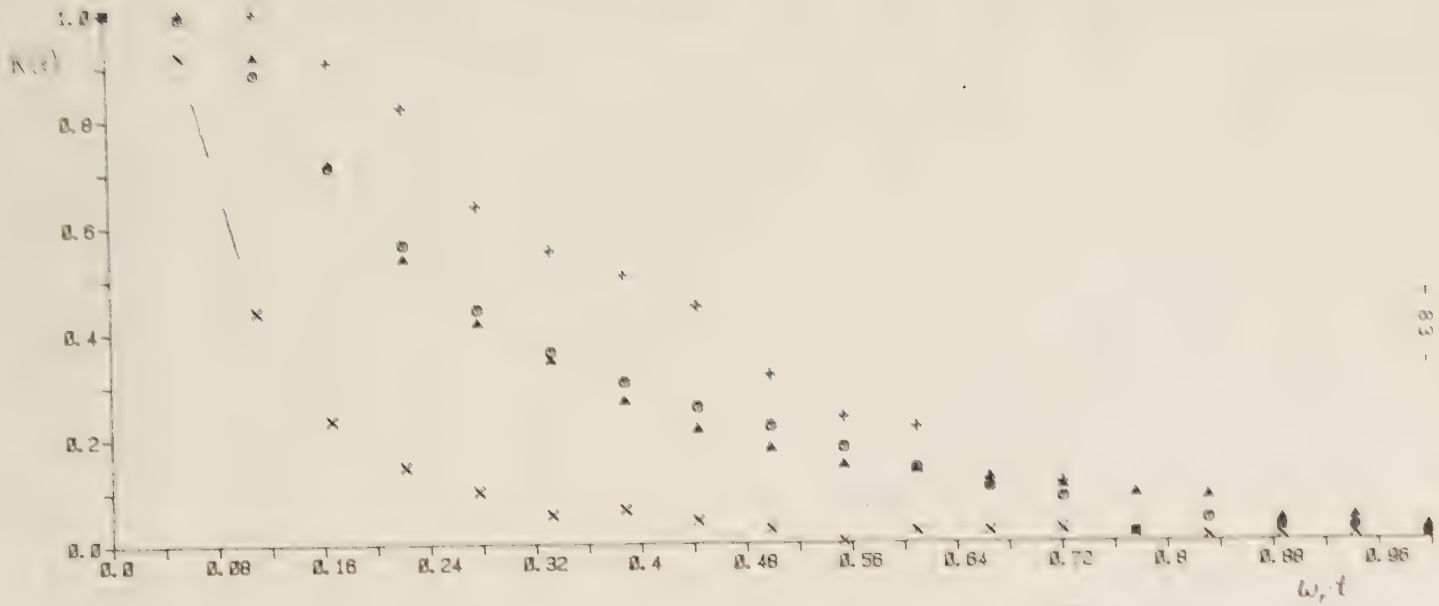


Abb. 4.3: Mikrofeld-Autokorrelationsfunktionen der Elektronen des mit N=32 Teilchen simulierten Systems ($\alpha^2=28$)
▲ für die normierte Anfangsfeldstärke $\beta_u=2,31$
+ für die normierte Anfangsfeldstärke $\beta_k=0,63$
× für die normierte Anfangsfeldstärke $\beta_o=6,65$
⊙ gemittelt (gemäß Gl. 4.2) über alle Anfangsfeldstärken ($\langle\beta\rangle=2,33$)

ist in Abb. 4.4 die Halbwertsbreite $t_{1/2}$ (definiert durch $K(t_{1/2}) = 0{,}5$) für ähnliche normierte Feldstärken wie in Abb. 4.1 als Funktion der Teilchenzahl aufgetragen. Zum Vergleich sind die nach Chandrasekhar und v. Neumann berechneten Halbwertsbreiten markiert, wobei natürlich die gegenüber dem Experiment etwas unterschiedliche Feldverteilung (vgl. hierzu Abschnitt 4.1 und 3.3.2) beachtet werden muß, ebenso wie der Einfluß des sich bei den Simulationen mit der Teilchenzahl ändernden Feldmittelwerts (siehe Abb. 3.24). Trotzdem ergibt sich eine gute Übereinstimmung, weil die Abweichung von Holtsmarkschen Verhältnissen bei den relativ kleinen Teilchenzahlen infolge des Fehlens merklicher Fernfeldbeiträge nur gering ist. Das gleiche gilt auch für Abb. 4.5, wo die Halbwertsbreite der Autokorrelationsfunktion, die aus den nach Abschnitt 3.4 erzeugten Feldern am Ort eines geladenen Aufpunkts berechnet wurde, aufgetragen ist.

Relativ schwach ist die Abhängigkeit der Halbwertsbreiten von der Feldstärke; bei einer Variation der Anfangsfeldstärke um den Faktor 10 variiert die Halbwertsbreite nur um etwa einen Faktor 3, was mit der schon im Zusammenhang mit Abb. 4.1 bzw. Gleichung 4.12 gemachten Bemerkung übereinstimmt. Für Nahfelder liegt dem die Vorstellung zugrunde, daß das Feld E durch einen Ladungsträger im Abstand $r = \sqrt{\frac{1}{E}}$ verursacht wird. Bei der Geschwindigkeit v ist die Korrelationszeit etwa $\tau(E) \approx \frac{r}{v} = \frac{\sqrt{\frac{1}{E}}}{v} = \frac{1}{v\sqrt{E}}$, so daß nach dieser Abschätzung ein zehnfach größeres Feld eine um den Faktor $\sqrt{10} \approx 3$ verminderte Korrelationszeit bewirkt.

In Abb. 4.6 werden die Halbwertsbreiten für einen neutralen Aufpunkt mit denen am Ort eines Ions verglichen. Die Halbwertsbreiten für sehr schwache und sehr starke Felder sind am Ort eines Ions etwas niedriger als an einem neutralen Aufpunkt, während sich die Halbwertsbreiten für mittlere Feldstärken etwa gleich verhalten. Offenbar klingen bei den betrachteten Teilchenzahlen und dem gewählten Plasmaparameter extreme Felder durch den Einfluß des zentralen Ions etwas schneller ab.

Insgesamt aber sind die Unterschiede zwischen einem neutralen und einem geladenen Aufpunkt ebenfalls nur gering. Bei überwiegendem Fernfeldeinfluß und $\alpha^3 \gg 1$ - was bei diesen Untersuchungen mit relativ kleinen Teilchenzahlen noch kaum der Fall ist - sollte nach Hunger und Larenz neben dem Unter-

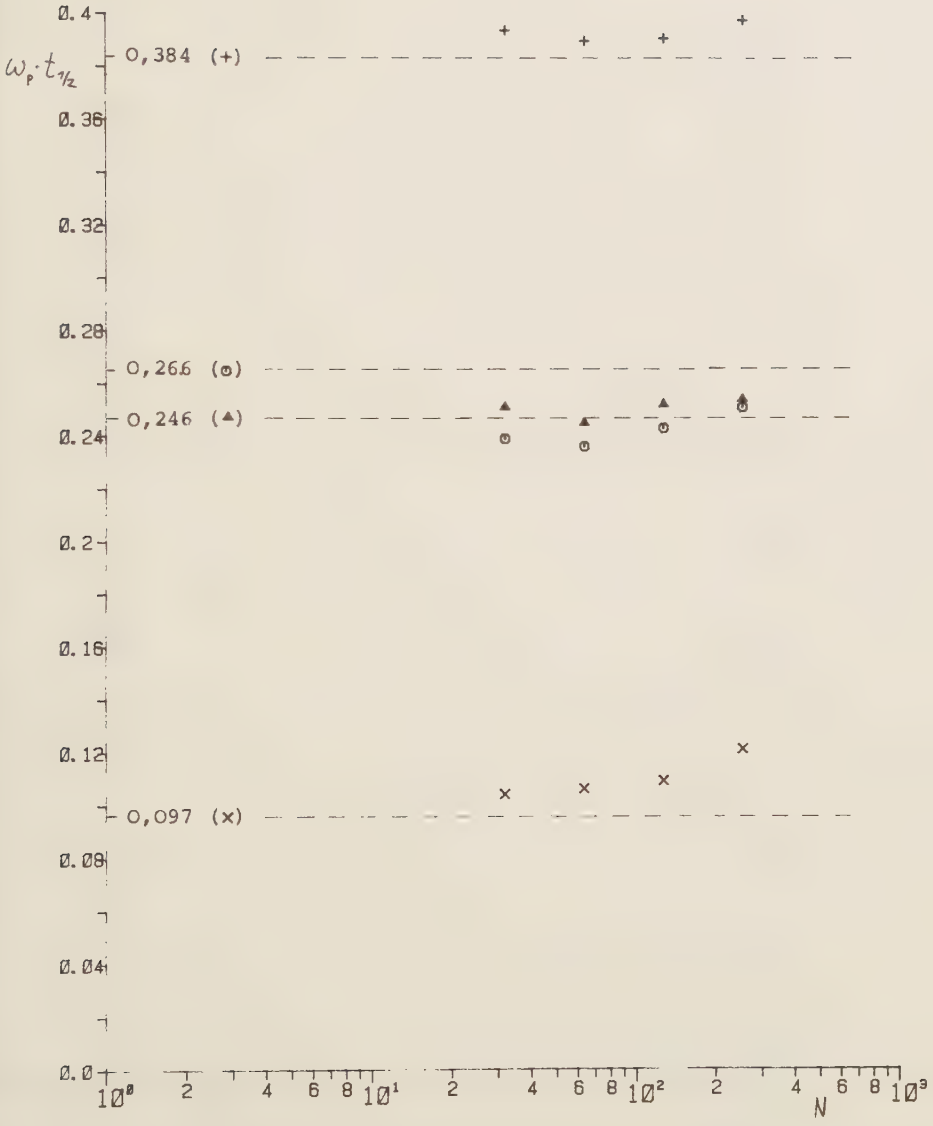


Abb. 4.4: Halbwertszeit der simulierten Autokorrelationsfunktion in Abhängigkeit von der Teilchenzahl N (α^2=28)
⊙ für die normierte Anfangsfeldstärke $\beta_M = \langle\beta\rangle$
\+ für die normierte Anfangsfeldstärke $\beta_K = \frac{4}{3}\langle\beta\rangle$
× für die normierte Anfangsfeldstärke $\beta_E = 3\langle\beta\rangle$
▲ gemittelt über alle Anfangsfeldstärken $\langle\beta\rangle = 2{,}4$
Gestrichelt sind nach Chandrasekhar berechnete

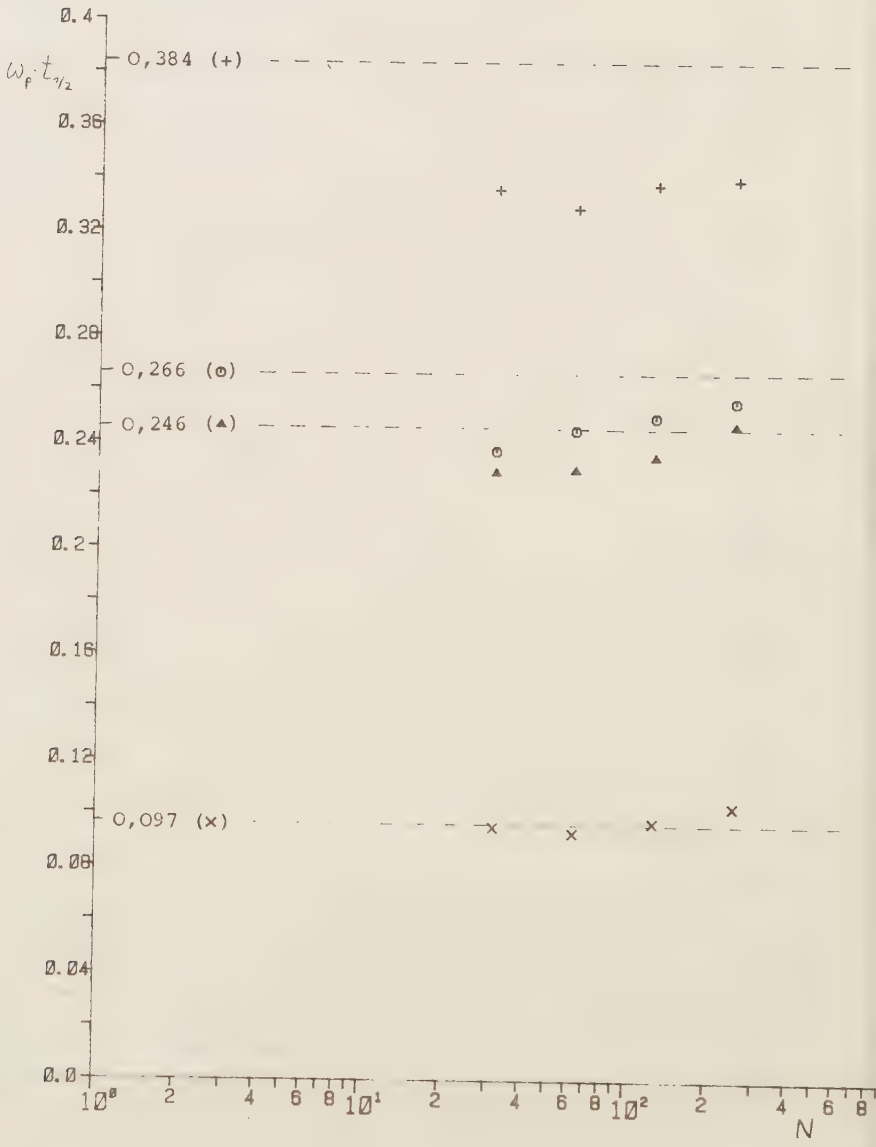


Abb. 4.5: Halbwertszeit der simulierten Autokorrelationsfunktion am Ort eines Ions in Abhängigkeit von der Teilchenzahl N (α^2=28)
⊙ für die normierte Anfangsfeldstärke $\beta_M = \langle\beta\rangle$
+ für die normierte Anfangsfeldstärke $\beta_K = \frac{1}{3}\langle\beta\rangle$
× für die normierte Anfangsfeldstärke $\beta_6 = 3\langle\beta\rangle$
▲ gemittelt über alle Anfangsfeldstärken $\langle\beta\rangle = 2,4$
Gestrichelt sind nach Chandrasekhar berechnete theoretische Werte (am neutralen Punkt)

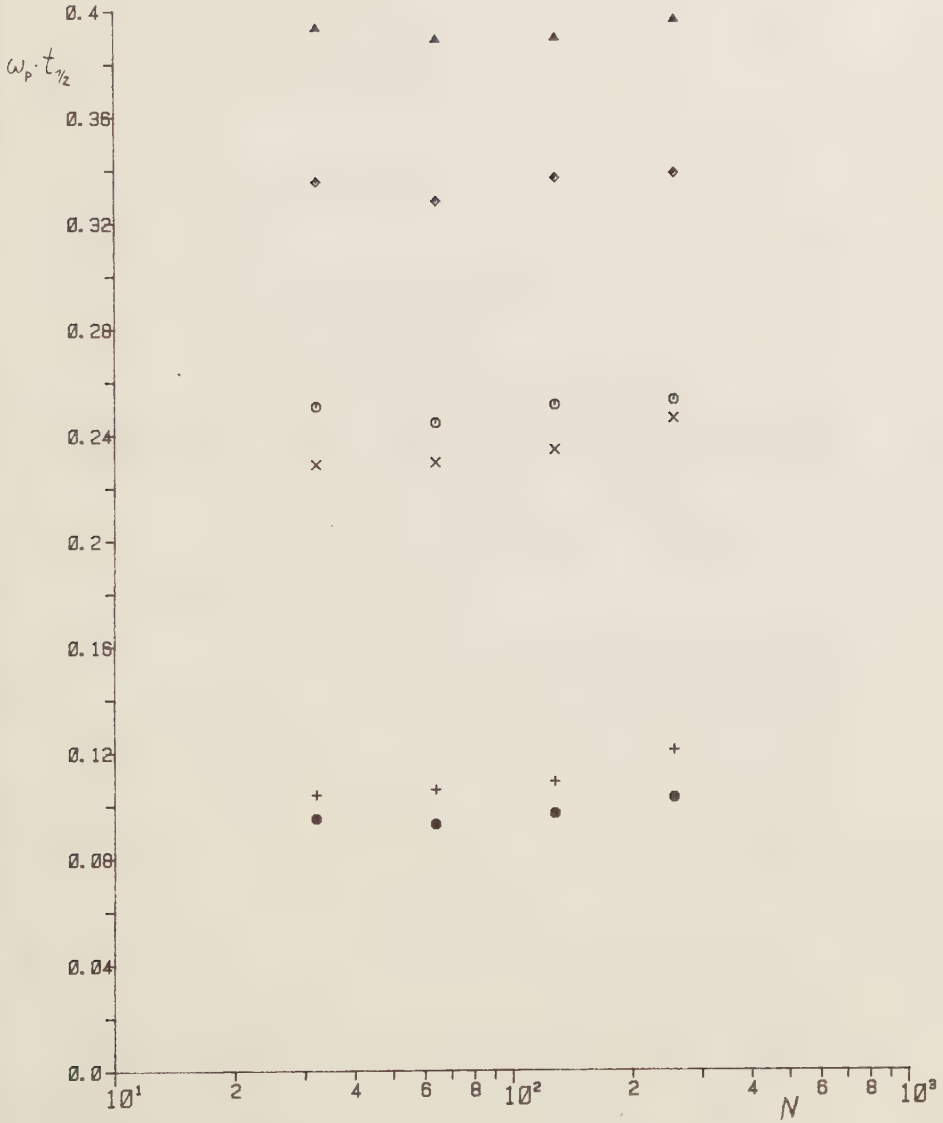


Abb. 4.6: Vergleich der Halbwertszeit der simulierten Autokorrelationsfunktion in Abhängigkeit von der Teilchenzahl N
an einem neutralen Aufpunkt ($\alpha^2=28$)
⊙ gemittelt über alle Anfangsfeldstärken $\langle\beta\rangle=2,4$
▲ für "kleine" Anfangsfeldstärken $\beta_k=\frac{1}{3}\langle\beta\rangle$
\+ für "große" Anfangsfeldstärken $\beta_g=3\langle\beta\rangle$
und am Ort eines Ions ($\alpha^2=28$)
× gemittelt über alle Anfangsfeldstärken $\langle\beta\rangle=2,4$
◆ für "kleine" Anfangsfeldstärken $\beta_k=\frac{1}{3}\langle\beta\rangle$

schied zwischen geladenem und ungeladenem Aufpunkt auch die Feldstärkenabhängigkeit der bedingten Korrelationsfunktion verschwinden, d.h. diese letztere Funktion reduziert sich auf die mittlere Autokorrelationsfunktion, wobei dann unter diesen Umständen die beiden Mittelungsvorschriften 4.2 und 4.3 dasselbe liefern.

Eine Anpassung der Korrelationsfunktion nach Hunger und Larenz (Gleichung 4.18) an die Simulationsergebnisse liefert für den Parameter γ den Wert $\gamma \approx 4{,}6$. Dieser Wert ist etwas niedriger als von der Theorie gefordert, d.h. die Felder erscheinen - wie bereits erwännt - etwas zu kurzlebig, was sich aus der bei den Simulationen benutzten Randbedingung (spiegelnde Reflexion an den Wänden) und insbesondere aus der Existenz eines scharfen Plasmarandes erklären könnte. Daher erfolgt auch der Abfall von K(t) gemäß Abb. 4.3 für größere Zeiten offensichtlich stärker als t^{-1}.

Kapitel 5

Zusammenfassung und Ausblick

In Anbetracht der vorliegenden unterschiedlichen Theorien zum Plasma-Mikrofeld und der Unmöglichkeit direkter Messungen ist hier versucht worden, mit den Methoden der Computersimulation einige Eigenschaften des Mikrofeldes in einem Plasma, das aus N/2 positiv und N/2 negativ geladenen punktförmigen Teilchen besteht, zu untersuchen.

Bereits vor mehr als sechzig Jahren wurde von Holtsmark die erste und bekannteste Mikrofeld-Theorie angegeben. Inzwischen sind viele weitere theoretische Arbeiten zu diesem Problem erschienen, wobei stellvertretend die Baranger-Mozer-Theorie genannt sei; aber es zeigte sich in den meisten Fällen, daß wie bei Holtsmark der Einfluß des dem Aufpunkt nächsten Ladungsträgers praktisch allein maßgebend für das Verhalten der Mikrofeldverteilung ist, ungeachtet der großen Reichweite des Coulombfeldes. Hunger und Larenz erkannten vor etwa fünfzehn Jahren, daß in der Holtsmark-Theorie (und in allen ähnlichen Theorien) infolge Nichtbeachtung einer ungleichmäßigen Konvergenz beim Grenzübergang $N \rightarrow \infty$ das kollektive Feld der entfernteren Ladungsträger verloren geht. Diese Autoren zeigen, daß sich die mit dem von ihnen angegebenen Verfahren berechnete Mikrofeldverteilung als Faltung einer Gauß- mit einer Holtsmark-Verteilung darstellen läßt, wobei die erstere insbesondere für dünne, heiße Plasmen den Charakter der Verteilung entscheidend bestimmt. Da das Fernfeld erst für sehr große Teilchenzahlen den Einfluß des Nahfeldes überwiegt, konnten die bisher veröffentlichten Computersimulationen zum Mikrofeld wegen der geringen Anzahl der simulierten Teilchen den Übergang von der Holtsmark- zur Gauß-Verteilung nur qua-

litativ andeuten.

Deshalb wird mit der sog. Monte-Carlo-Methode unter maximaler Ausnutzung aller Möglichkeiten der heute vorhandenen sequentiellen Rechner für Teilchenzahlen zwischen etwa 10 und 10^3 die Mikrofeldverteilung als Ensemblemittel über bis zu 20000 Konfigurationen berechnet. Diese Zahlen liegen wesentlich höher als die in den bisherigen Simulationen benutzten Teilchenzahlen. Zusätzlich wird durch die Simulationen zum ersten Mal die Gaußverteilung des Fernfeldes durch getrennte Aufzeichnung des von den beiden dem Aufpunkt nächsten Nachbarn erzeugten Feldes ("Nahfeld") und des Feldes der übrigen N-2 Teilchen ("Fernfeld") bestätigt. Der Vergleich einiger Momente mit den entsprechenden Werten nach der Holtsmark-Theorie zeigt, daß bei niedrigen Teilchenzahlen die auf endliche Teilchenzahlen erweiterte Theorie nach Holtsmark die numerischen Werte gut beschreibt. Jedoch ab $N \approx 10^6$ tritt der Einfluß der nächsten Nachbarn zunehmend zurück, und das Gaußsche Fernfeld bestimmt in entscheidender Weise das Gesamtfeld, dessen Medianwert proportional zur zwölften Wurzel aus der Teilchenzahl anzuwachsen scheint, wie es die Theorie von Hunger und Larenz fordert.

Da durch die Monte-Carlo-Methode nur statische Eigenschaften ermittelt werden können, werden außerdem unter Berücksichtigung der Coulomb-Kräfte zwischen den Teilchen Computerexperimente nach der "molecular-dynamics"-Methode durchgeführt. Bei diesen Experimenten wird die Bahn jedes einzelnen Teilchens durch numerische Integration der Bewegungsgleichungen berechnet. Ein Verfahren zur Steuerung der Integrationsschrittweite bewirkt, daß bei minimaler Rechenzeit die Abweichung von der Anfangsenergie des abgeschlossenen Systems möglichst gering bleibt. Durch die Berücksichtigung der N-Teilchen-Wechselwirkung steigt hier die Rechenzeit proportional zu N^2, während sie bei der Monte-Carlo-Methode nur proportional zu N wächst. Weitere Probleme bereiten die zwei Zeitskalen, die durch das reale Elektronen-Protonen-Massenverhältnis der simulierten Teilchen entstehen. Deshalb ließen sich diese Simulationen mit der verfügbaren Rechnerleistung nur für Teilchenzahlen zwischen 32 und 256 über je 110 Ionen-Plasmafrequenzperioden durchführen. Ebenso wie durch Scharmittelung bei der Monte-Carlo-Verfahren können die Momente der Mikrofeldverteilung durch Mittelung über die Simulationszeit

bestimmt werden. Beim Vergleich mit den Ergebnissen der Monte-Carlo-Methode fällt auf, daß im untersuchten Teilchenzahlbereich durch den jetzt vorhandenen Einfluß der Wechselwirkung die Feldstärkenmittelwerte zwar etwas niedriger ausfallen, aber der nach der Baranger-Mozer-Theorie (bei $N \to \infty$) geltende Mittelwert wird bei den erwähnten geringen Teilchenzahlen bereits deutlich überschritten. Die "Schiefe" als Repräsentant des dritten Moments weist wie bei der Monte-Carlo-Simulation mit wachsender Teilchenzahl eine abnehmende Tendenz in Richtung auf eine Gaußverteilung auf.

Ähnliche Simulationen zur Bestimmung des Mikrofeldes auf einem geladenen Aufpunkt, dargestellt durch ein im Zentrum des Simulationsvolumens ruhendes, positiv geladenes Teilchen, zeigen, daß gegenüber dem neutralen Aufpunkt nur ein geringer Unterschied besteht, welcher nach der Theorie von Hunger und Larenz im Grenzfall dünner, heißer Plasmen ganz verschwinden sollte.

Weiterhin kann numerisch verifiziert werden, daß Berandungseinflüsse keine merklichen Auswirkungen auf die Ergebnisse haben. Simulationen mit Teilchen gleicher Masse (Elektronen-Positronen-System) führen im Vergleich mit den ursprünglichen Simulationen zu niedrigeren Feldmittelwerten. Eine Vernachlässigung der Teilchenwechselwirkung führt zu höheren mittleren Feldern, ähnlich wie sie die Monte-Carlo-Methode liefert, wobei im Grenzfall nahezu ergodischer Systeme beide Verfahren die gleichen Verteilungsfunktionen liefern sollten.

Die mit Hilfe der "molecular-dynamics"-Simulation gewonnenen zeitabhängigen Mikrofelder werden ferner dazu benutzt, zeitliche Autokorrelationsfunktionen durch Mittelung über viele Anfangszeiten zu berechnen. Wenn Ionen- und Elektronenkomponente des Mikrofeldes mit der zugehörigen Plasmafrequenz skaliert werden, zeigen sie die gleiche Zeitabhängigkeit. Im untersuchten Teilchenzahlbereich zeigt sich nur eine schwache Abhängigkeit der Halbwertsbreite der Autokorrelationsfunktionen von der Teilchenzahl.

Zusätzlich können die Auswertungen noch in Abhängigkeit von den Anfangsfeldstärken getrennt durchgeführt werden, um bedingte Autokorrelationsfunktionen zu erhalten. Die Variation der Halbwertsbreite in Abhängigkeit von der Anfangsfeldstärke ist nur gering wie auch der Unterschied zwischen den Halb-

wertsbreiten für einen geladenen und einen neutralen Aufpunkt, wie nach der Theorie von Hunger und Larenz zu erwarten. Da aufgrund der erwähnten niedrigen Teilchenzahlen der Fernfeldeinfluß fehlt, stellt sich eine gute Übereinstimmung mit der auf Holtsmarkscher Grundlage erstellten Theorie von Chandrasekhar und v. Neumann heraus.

Mit Woltz, Iglesias und Hooper /65/ ist zu hoffen, daß auf der Basis der jetzt verfügbaren Rechenprogramme die Simulationen fortgesetzt werden. Denn wegen der beschränkten Rechenzeit konnten alle dynamischen Experimente in dieser Arbeit nur für einen festen Parameter $\alpha^2 = \frac{k_B T}{e^2 n^{1/3}} = 28$ durchgeführt werden. Um jedoch die Abhängigkeit von Dichte und Temperatur überprüfen zu können, welche die verschiedenen Theorien unterschiedlich angeben, wäre es nötig, die Simulationen mit geändertem Parameter α^2 und auch bei höheren Teilchenzahlen weiterzuführen. Dies könnte besonders gut auf den jetzt verfügbaren sog. Vektorrechnern /66, 67/ geschehen, die sicherlich um einen Faktor 10 schneller sind als die bisher benutzten, sequentiell arbeitenden Rechner. Diese neue Rechnergeneration könnte auch Fortschritte für die Monte-Carlo-Simulation bringen, um bei Teilchenzahlen über 10^8 hinaus den weiteren Verlauf der Momente der Mikrofeldverteilung mit der Theorie zu vergleichen.

Andererseits muß man sich darüber im Klaren sein, daß eine wirklich realistische Plasmasimulation außerordentlich große Teilchenzahlen N erfordert; so benötigt man beispielsweise unter den Bedingungen des genannten Plasmaparameters $\alpha^2 = 28$ mehr als $N = 10^{14}$ Teilchen, wie man durch Gleichsetzung der Feldstärkenquadrate gemäß den Formeln 2.66 und 2.85 ermittelt, wobei also größenordnungsmäßige Gleichheit der Fernfeldbeiträge nach den Theorien mit bzw. ohne Berücksichtigung der Wechselwirkung verlangt wird.

Anhang A

Entwicklung der Holtsmark-Verteilung für große N

Mit den Bezeichnungen wie in Abschnitt 2 ergibt sich ausgehend von den Gleichungen 2.19 bis 2.23 für die Fourier-Transformierte des Mikrofeldes:

$$A(K,N) = \left[1 - \frac{2\pi n}{N}(e_0 K)^{3/2} \int_{z_1}^{\infty} \left(1 - \frac{\sin z}{z}\right) z^{-5/2}\, dz\right]^N ,$$

wobei sofort der Grenzübergang $R_0 \longrightarrow 0$ ($z_0 \longrightarrow \infty$) ausgeführt wurde. Um die Entwicklung für große N zu erleichtern, wird das Integral aufgespalten:

$$A(K,N) = \left[1 - \frac{2\pi n}{N}(e_0 K)^{3/2} \left\{ \int_0^{\infty} \left(1 - \frac{\sin z}{z}\right) z^{-5/2}\, dz - \int_0^{z_1} \left(1 - \frac{\sin z}{z}\right) z^{-5/2} dz \right\}\right]^N$$

Diese beiden Integrale führen zu dem bereits in Gleichung 2.25 allgemein angegebenen Ergebnis, welches hier nur eingesetzt wird:

$$A(K,N) = \left[1 - \frac{2\pi n}{N}(e_0 K)^{3/2} \left\{ \frac{4}{15}\sqrt{2\pi} - \left[-\frac{2}{3} z_1^{-3/2} + \frac{2}{5} \frac{\sin z_1}{z_1^{3/2}} + \frac{4}{15} \frac{\cos z_1}{z_1^{3/2}} - \right.\right.\right.$$

$$\left.\left.\left. - \frac{8}{15} \frac{\sin z_1}{z_1^{1/2}} + \frac{8}{15}\sqrt{2\pi} \cdot C_1\left(z_1^{1/2}\right) \right] \right\}\right]^N$$

($C_1(x)$ ist das in Gleichung 2.24 definierte Fresnel-Integral.) Wegen $z_1 = \frac{e_0 K}{R^2} = \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{2/3} \left(\frac{n}{N}\right)^{2/3} e_0 K \ll 1$ kann $C_1(x)$ gemäß /144/ in der Form

$$C_1(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j x^{4j+1}}{(2j)!\,(4j+1)}$$

entwickelt werden. Dies und die Entwicklung der trigonometri-

die Programme implementiert werden.) Dann liefert die obige Ungleichung mit

$$\vec{p} = m\,\vec{v}$$

(m = Teilchenmasse)

und

$$\frac{m}{2}\langle\vec{v}^{\,2}\rangle = \frac{3}{2}k_B T$$

(k_B = Boltzmannkonstante)

eine Bedingung für die erlaubten (n,T)-Wertepaare.

Schließlich sei angenommen, daß alle vorkommenden Stöße elastisch sind, damit die Teilchenzahl sich nicht durch Ionisations- oder Rekombinationsvorgänge ändert.

Der Einfluß der das Volumen V umschließenden Berandung ist in Abschnitt 3.1.3.1 und 3.3.3.3 diskutiert.

Anhang C

Normierung der benutzten Größen

Für die numerischen Rechnungen müssen alle physikalischen Größen geeignet normiert werden. Ausgehend vom cgs-System werden dazu die drei Größen

Elementarladung $e_o = 4{,}80 \cdot 10^{-10}\ cm^{3/2}\ g^{1/2}\ sec^{-1}$,

Elektronenmasse $m_o = 9{,}11 \cdot 10^{-28}\ g$ und

Länge $l_o = (N/n)^{1/3}$

als Basisgrößen festgelegt. Für die Dimension $M^x \cdot L^y \cdot Z^z$ (M = Masse, L = Länge, Z = Zeit) einer beliebigen Größe gilt dann

$$M^x \cdot L^y \cdot Z^z = (L^{3/2} \cdot M^{1/2} \cdot Z^{-1})^a \cdot M^b \cdot L^c .$$

Eine kurze Umformung führt zu den Bestimmungsgleichungen

$$a = -z$$
$$b = x + 1/2\ z$$
$$c = y + 3/2\ z$$

Die Größen in diesem neuen Einheitensystem seien durch "^" gekennzeichnet.

Der einzige dimensionslose Parameter außer der Teilchenzahl N zur Charakterisierung eines Plasmas im thermodynamischen Gleichgewicht ergibt sich aus

$$(L^{3/2} \cdot M^{1/2} \cdot Z^{-1})^a \cdot M^b \cdot L^c \cdot (M^1 \cdot L^2 \cdot Z^{-2}) = 1$$

als von der Dimension Energie $\cdot$ (Ladung)$^{-2}$ $\cdot$ Länge und ist proportional zu dem schon von Wilke /36/ benutzten Verhältnis α^2 aus mittlerer kinetischer Energie und potentieller Energie zweier Teilchen im mittleren Abstand $n^{-1/3}$:

$$\alpha^2 = \frac{K_B T}{e_o^2\, n^{1/3}}$$

Alle Größen eines Plasmas können dann durch diesen einen Para-

meter α^2 und durch die Teilchenzahl N ausgedrückt werden. Einige der im folgenden benötigten Größen sind in Tabelle C.1 angegeben.

Der allgemein gebräuchliche Plasmaparameter

$$\Lambda = \frac{1}{n \cdot \lambda_D^3}$$

mit der sog. Debye-Länge

$$\lambda_D = \left(\frac{K_B T}{4\pi n e_0^2} \right)^{1/2}$$

hängt mit dem oben definierten Parameter α^2 gemäß

$$\Lambda = \left(\frac{4\pi}{\alpha^2} \right)^{3/2} \simeq \frac{44{,}5}{\alpha^3}$$

zusammen, und der bei einigen Theorien zum Mikrofeld benutzte Abschirmparameter y /45/ gemäß

$$y = \frac{r_0}{\lambda_D^*} = \left(\frac{15}{4} \right)^{1/3} \frac{1}{\alpha} = \frac{1{,}554}{\alpha}$$

(mit r_0 aus

$$\frac{4}{15} (2\pi)^{3/2} \cdot r_0^3 \cdot n = 1$$

und

$$\lambda_D^* = \left(\frac{K_B \cdot T}{4\pi n_e e_0^2} \right)^{1/2} = \sqrt{2} \cdot \lambda_D).$$

Aus z.B. der Wahl

$$n = 10^{14} \text{ cm}^{-3} \text{ und } T = 10^4 \text{ K}$$

ergibt sich der Parameter α^2 zu $\alpha^2 = 28$, sowie Λ und y zu $\Lambda = 0{,}30$ und $y = 0{,}29$. Diese Werte werden bei allen dynamischen Simulationen gemäß Abschnitt 3.3 und 3.4 benutzt.

Bei Teilchenzahlen N zwischen 10 und 10^9 liegt das simulierte Volumen V dann zwischen 10^{-15} cm^3 und 10^{-8} cm^3. Im Volumen einer Kugel mit dem Radius λ_D ("Debye-Sphäre") befinden sich dann etwa 14 Teilchen.

physik. Größe	Definition	norm. Größe
Temperatur	$T = \frac{m \cdot \langle v^2 \rangle}{3 K_B}$	$\hat{T} = \alpha^2 \cdot N^{1/3}$
Massenverh.	$\theta = \frac{M}{m_e}$	$\hat{\theta} = \theta = 1836$
Landau-Länge	$\ell_L = \frac{e_0^2}{K_B T}$	$\hat{\ell}_L = \frac{1}{\alpha^2 N^{1/3}}$
Debye-Länge	$\lambda_D = \left(\frac{K_B T}{4\pi n e_0^2}\right)^{1/2}$	$\hat{\lambda}_D = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \frac{\alpha}{N^{1/3}}$
Elektronen-Plasmafrequenz	$\omega_p = \left(\frac{4\pi n e_0^2}{m_e}\right)^{1/2}$	$\hat{\omega}_p = 2\sqrt{\pi}\, N^{1/2}$
Ionen-Plasmafrequenz	$\omega_{p_i} = \left(\frac{4\pi n e_0^2}{M}\right)^{1/2}$	$\hat{\omega}_{p_i} = \frac{2\sqrt{\pi}}{\theta^{1/2}} N^{1/2}$
Plasma-Param.	$\Lambda = \frac{1}{n \lambda_D^3}$	$\hat{\Lambda} = \Lambda = \left(\frac{4\pi}{\alpha^2}\right)^{3/2}$
Abschirm-Param.	$y = \frac{r_0}{\sqrt{2}\lambda_D}$	$\hat{y} = y = \left(\frac{15}{4}\right)^{1/3} \frac{1}{\alpha}$
Normalfeldstärke (Holtsmark)	$E_0 = \left(\frac{4}{15}\right)^{2/3} \cdot 2\pi e_0 n^{2/3}$	$\hat{E}_0 = \left(\frac{4}{15}\right)^{2/3} 2\pi N^{2/3}$
Normalfeldstärke (Hunger-Larenz)	$E_{HL} = (8\pi n K_B T)^{1/2}$	$\hat{E}_{HL} = 2\sqrt{2\pi}\, \alpha \cdot N^{2/3}$

Tab. C.1: Darstellung einiger physik. Größen durch α und N

Anhang D

Erzeugung gleichverteilter Zufallszahlen

Die Erzeugung von Zufallszahlen auf einem Digitalrechner geschieht streng deterministisch. Deshalb müßte korrekterweise statt von Zufallszahlen von "Pseudozufallszahlen" gesprochen werden. Da dies im Zusammenhang mit digitalen Simulationen zu keinen Mißverständnissen führt, sei in Anlehnung an den üblichen Sprachgebrauch darauf verzichtet.

Gesucht wird ein Algorithmus mit möglichst kurzer Ausführungszeit, der eine Zahl erzeugt, welche alle Eigenschaften einer gleichverteilten zufälligen Größe besitzt. Lehmer /68/ gab dafür 1951 die "lineare Kongruenzmethode" an, welche nach der Gleichung

$$x_{i+1} = \{ a \cdot x_i + c \} \bmod m \qquad i = 0, 1 \ldots$$

aus dem Startwert x_0, einer positiven ungeraden Zahl, eine Folge von positiven ganzen Zahlen zwischen 1 und m berechnet und welche heute fast ausschließlich benutzt wird. Zahlreiche zahlentheoretische Untersuchungen der Eigenschaften der Folge $\{ x_i \}$ ergaben die Werte /69/

$$a = 7^5 = 16807$$
$$c = 0$$
$$m = 2^{31} - 1 = 2147483647$$

(Wahl der letzteren Zahl aufgrund der internen Zahlendarstellung der benutzten Computer) als optimal im Sinne einer großen Wiederkehrperiode und statistischer Unabhängigkeit der erzeugten Zahlen. Für sehr große Periodenlängen empfiehlt sich eine Form dieses Generators nach Carter Bays und Durham /70/, bei der auf eine Tabelle mit Zufallszahlen, die nach der Lehmerschen Methode gewonnen werden, mit einer als Index benutzten

weiteren Zufallszahl zugegriffen wird (siehe auch /39/). Die oben erwähnten günstigen Eigenschaften eines Vorläufers dieser Methode wurden von Gebhardt /71/ nachgewiesen.

Um die zur Simulation benötigten normierten rationalen Zahlen zu erhalten, werden die erzeugten ganzen Zahlen durch $m + 1 = 2^{31}$ dividiert. Für die Experimente mit N Teilchen im dreidimensionalen Raum werden 3N dieser Zahlen generiert und nach Subtraktion von 0,5 den x-, y- und z-Komponenten der N Ortsvektoren zugewiesen.

Als Beispiel für die dreidimensionale Füllung des Einheitswürfels mit Zufallszahlen ist in Tabelle D.1 die Belegung von 125 Unterwürfeln angegeben.

Im übrigen läßt die Anwendung des beschriebenen Generators im mehrdimensionalen Fall infolge der eintretenden "Verwischung" keinerlei Wiederkehrtendenzen in den Zufallskoordinaten befürchten.

9	2	3	-3	-3
-1	-7	4	3	-2
6	1	7	3	-2
5	3	-5	-2	12
-7	-6	5	1	6
6	-2	2	-5	5
-5	-3	2	2	3
5	0	-2	-5	-4
-4	-1	4	2	-6
-3	0	7	-2	-8
-4	4	-7	0	-2
4	-2	2	-6	-5
-1	-3	-5	0	-9
-4	-3	1	-9	-2
7	-4	3	-3	-9
7	-1	0	2	-9
-0	1	1	1	2
7	-3	12	-1	4
5	1	-1	2	-7
13	6	-8	-2	2
-1	2	-1	1	4
0	5	-4	-1	-2
-7	-11	4	-1	-2
6	9	-3	-4	2
5	-7	4	-0	-2

Tab. D.1: Relative Abweichung Δ (in Prozent) vom Mittelwert der Belegung für eine Unterteilung des Würfels in 125 Subwürfel bei 50000 Zufallszahlen, d.h. pro Subwürfel eine Belegung von 400 Zahlen. Es ergibt sich $\langle\Delta\rangle = 0$ (zufällig) und $\sqrt{\langle\Delta^2\rangle} \approx 18{,}9 \approx \sqrt{400}$.

Anhang E

Erzeugung normalverteilter Zufallszahlen

Zur Erzeugung normalverteilter Zufallszahlen für die Komponenten der Geschwindigkeit wird eine gleichverteilte Zufallszahl über die inverse Normalverteilung transformiert. Die inverse Normalverteilung wird gemäß /72/ auf dem Rechner approximiert. Da für die vorliegenden Probleme nur wenige normalverteilte Zufallszahlen gebraucht werden, konnte auf eine schnellere Erzeugungsmethode (z.B. nach /73/) verzichtet werden.

Wegen der verhältnismäßig kleinen Anzahl der benötigten Zufallszahlen geschieht es häufig, daß die Maxwellverteilung für den Betrag der normierten Geschwindigkeit $\hat{v}$

$$f_M(\hat{v}) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \hat{v}^2 e^{-\hat{v}^2}$$

von der erzeugten Stichprobe nur unvollkommen repräsentiert wird. Der gesamte Geschwindigkeitsbereich wird deshalb in L unterschiedlich lange Intervalle unterteilt, deren Länge so bestimmt wird, daß sie jeweils den gleichen Anteil an der Gesamtzahl enthalten:

$$\int_{\hat{v}_{i-1}}^{\hat{v}_i} f(\hat{v})\, d\hat{v} = \frac{1}{L}$$

mit

$$\hat{v}_o = 0 \text{ und}$$
$$\hat{v}_L = \infty ,$$

womit sich die $\hat{v}_i$ (i = 1, ..., L-1) aus

$$erf(\hat{v}_i) - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \hat{v}_i e^{-\hat{v}_i^2} - \frac{1}{L} = 0$$

(mit der Fehlerfunktion /44/

$$erf(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} \, dt \;)$$

berechnen lassen. Numerisch ergeben sich für den bei den dynamischen Simulationen benutzten Wert L = 8 die folgenden Intervallgrenzen:

$\hat{v}_1 = 0{,}5084,$
$\hat{v}_2 = 0{,}7786,$
$\hat{v}_3 = 0{,}9365,$
$\hat{v}_4 = 1{,}088,$
$\hat{v}_5 = 1{,}247,$
$\hat{v}_6 = 1{,}433,$
$\hat{v}_7 = 1{,}694.$

Das Erzeugungungsverfahren läuft so ab, daß normalverteilte Zufallszahlen erzeugt und dann entweder akzeptiert oder verworfen werden, bis alle Intervalle 1/L der insgesamt benötigten Zahlen enthalten.

Diese Methode bewirkt zwar eine weitere Verringerung der Erzeugungseffizienz, aber dafür ergibt sie eine bessere Annäherung der Stichprobe an die Maxwellverteilung (vgl. Abb. E.1), was bei den vorliegenden Simulationen im Hinblick auf möglichst kurze "Thermalisierungsvorgänge" (siehe Abschnitt 3.3.1) erstrebenswert ist.

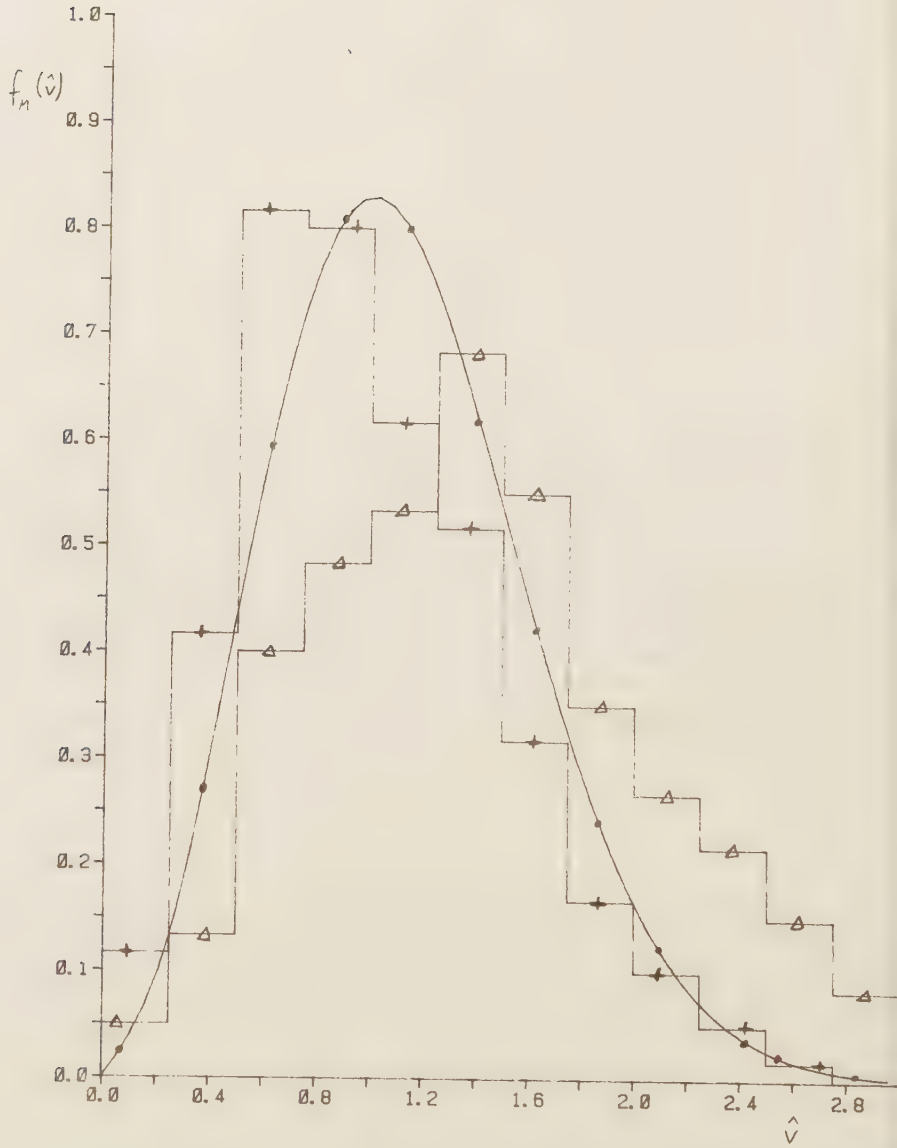


Abb. E.1: Vergleichsbeispiel bei Anwendung der beiden Verfahren zur Erzeugung Maxwellverteilter Zufallszahlen

△ ursprüngliches Verfahren
\+ verbessertes Verfahren
● theoretische Maxwell-Verteilung

Literaturverzeichnis

/1/ J. Holtsmark — Über die Verbreiterung von Spektrallinien
Ann. Phys. 58, 577 (1919)

/2/ J. Holtsmark — Über die Verbreiterung von Spektrallinien
Physik. Z. 20, 162 (1919)

/3/ P. Debye — Das molekulare elektrische Feld in Gasen
Physik. Z. 20, 160 (1919)

/4/ R. Cans — Das elektrische Molekularfeld
Ann. Phys. 66, 396 (1921)

/5/ J. Holtsmark — Über die Verbreiterung von Spekrallinien II
Physik. Z. 25, 73 (1924)

/6/ S. Chandrasekhar — Stochastic Problems in Physics and Astronomy
Rev. Mod. Phys. 15, 1 (1943)

/7/ K. Weise — Die Verteilungen des elektrischen Mikrofeldes und Mikropotentials im Plasma
Z. Phys. 183, 36 (1965)

/8/ K. Weise — Die Verteilungen des elektrischen und magnetischen Mikrofeldes im relativistischen Plasma
Z. Phys. 212, 458 (1968)

/9/ K.Weise und J. Birn — Der Einfluß eines Dichtegradienten auf die Verteilung des Gravitations-Mikrofeldes in Sternhaufen
Z. Phys. 212, 449 (1968)

/10/ G. Kelbg — Zur Theorie des Mikrofeldes im Plasma
Ann. Phys. 13, 385 (1964)

/11/ G. Dalenoort — Short-Range Corrections to the Probability Distributions of the Electric Microfield in a Plasma
Physica 45, 283 (1969)
The Holtsmark-Continuum Model for the Statistical Description of a Plasma
Z. Phys. 248, 22 (1971)

/12/ S. Rand
Effects of Dynamic Ion Shielding on the Stark Broadening of Spectral Lines
JQSRT 9, 921 (1969)

/13/ G. Ecker
Das Mikrofeld in Gesamtheiten mit Coulombscher Wechselwirkung
Z. Phys. 148, 593 (1957)
Plasmapolarisation und Träger-wechselwirkung
Z. Phys. 153, 317 (1958)
Individual and Collective Aspects of the Microfield Distribution
Z. Naturforsch. 26a, 1360 (1971)
Dynamic Screening Model of the Electric Microfield Distribution
Z. Naturforsch. 30a, 413 (1975)

/14/ C. Hooper jr.
Electric Microfield Distributions in Plasmas
Phys. Rev. 149, 77 (1966)
Low Frequency Component Electric Microfield Distributions in a Plasma
Phys. Rev. 165, 215 (1968)

/15/ F. Engelmann
Quantum Mechanical Treatment of Electric Microfield Problems in Plasmas
Z. Phys. 169, 126 (1962)

/16/ T. Morita
Virial Expansion Formulae for the Microfield and Micropotential Distribution Functions and their Application to a High Temperature Plasma
Progr. Theor. Phys. 23, 1211 (1960)

/17/ R.W. Larenz
Nyquist-Formel, Debye-Länge und Mikrofeld im Plasma
Proc. 5th Int. Conf. Ion. Phen. in Gases, München 1961, 1650 (1961)

/18/ V. Alyamovskii
Electric Microfield Distributions in an Ionized Gas
Sov. Phys. JETP 15, 1067 (1962)

/19/ K. Hunger und R.W. Larenz
Kurzmitteilung zum Plasma-Mikrofeld
Beitr. Plasmaphys. 3, 161 (1963)

/20/ K. Hunger und R.W. Larenz
Das Mikrofeld im Plasma
Z. Phys. 163, 245 (1961)

/21/ K. Hunger und R.W. Larenz
Critical Remarks on the Theory of Pressure Broadening of Spectral Lines
Ann. d'Astroph. 23, 853 (1960)

/22/ G. Hettner und H. Wagner
Fourier-Analyse des elektrischen Mikrofeldes in einem Plasma
I. Ann. Phys. 4, 89 (1959)
II. Ann. Phys. 5, 405 (1960)

/23/ W. Finkelnburg und H. Maecker
Elektrische Bögen und Thermisches Plasma
in: S. Flügge (Hrsg.)
Handbuch der Physik, Bd. 23, S. 373
Springer-Verlag, Berlin 1956

/24/ K. Hunger und R.W. Larenz
Zum kollektiven Anteil des Plasma-Mikrofeldes
Z. Naturforsch. 23a, 1488 (1968)

/25/ R.W. Larenz
Schwankungstheoretische Behandlung von Integralen mit Singularitäten im Zusammenhang mit statistischen Fragestellungen
Pers. Mitteilung, 1982

/26/ K. Wilke, K. Hunger und R.W. Larenz
The Adiabatic Linear Stark Effect in a Plasma
Technical Note AF 61(052)-161
Hannover 1964

/27/ J. Seidel
Die Verbreiterung von Wasserstofflinien durch den Stark-Effekt in zeitveränderlichen Feldern
Dissertation, Düsseldorf 1974

/28/ J. Semlyen
Zur Relaxationslänge der Elektronen in heißen und dünnen Gleichgewichtsplasmen
Dissertation, Düsseldorf 1981

/29/ A. Koller
Zur Mathematischen Theorie der Nichtgleichgewichtsvorgänge im Plasma
Verlag f. Flugtechnik, Stuttgart 1960

/30/ B. Alder, S. Fernbach, and M. Rotenberg (Eds.)
Methods of Computational Physics,
Vol. 9 (Plasma Physics)
Academic Press, New York 1970

/31/ I. Prigogine
Time, Structure, and Fluctuation
Science 201, 777 (1978)

/32/ K. Hunger, R.W. Larenz und K. Wilke
Zum Plasma-Mikrofeld
Z. Naturforsch. 20a, 158 (1965)

/33/ K. Hunger, R.W. Larenz und K. Wilke
On the Significance of the Far Field Portion of The Plasma Microfield
Proc. 7th Int. Conf. Phen. Ion. Gases, Beograd 1966, Vol. 2, 29 (1966)

/34/ R.W. Larenz
Theoretische und experimentelle Untersuchungen zum Mikrofeld im vollionisierten Plasma
Kleinheubacher Ber. 11, 273 (1966)

/35/ R.W. Larenz
Einsatz von elektronischen Rechenanlagen in der physikalischen und astronomischen Statistik
Antrittsvorl. Düsseldorf 1967
Jahrbuch der Universität Düsseldorf 1968/6
S. 105
Triltsch Verlag, Düsseldorf 1970

/36/ K. Wilke
Numerische Untersuchungen charakteristischer Größen eines Plasmamodells
Z. Naturforsch. 23a, 761 (1968)

/37/ F. Fluck und R.W. Larenz
Computersimulation des Plasmamikrofeldes bei größeren Teilchenzahlen
Verh. DPG (VI) 5, 56 (1970)

/38/ N. Kreitz
Monte-Carlo-Untersuchungen zum Mikrofeld bei großen Teilchenzahlen unter Holtsmark'schen Voraussetzungen
Verh. DPG (VI) 10, 280 (1975)

/39/ N. Kreitz
Numerische Plasma-Mikrofeld-Untersuchungen bei großen Teilchenzahlen unter Holtsmarkschen Bedingungen
Diplomarbeit,
Universität Düsseldorf, 1975

/40/ R.W. Larenz
Kombinatorische Herleitung des kollektiven Mikrofeldanteils
Verh. DPG (VI) 4, 275 (1969)

/41/ M. Fisher and D. Ruelle
The Stability of Many-Particle Systems
J. Math. Phys. 7, 260 (1966)

/42/ D. Mihalas
Stellar Atmospheres
Freeman and Co., San Francisco 1978

/43/ R. Gans
Über den Abstand der Molekeln
Physik. Z. 23, 108 (1922)

/44/ M. Abramowitz and I. Stegun
Handbook of Mathematical Functions
Dover Publ., New York 1968

/45/ M. Baranger and B. Mozer
Electric Field Distributions in an Ionized Gas
I. Phys. Rev. 115, 521 (1959)
II. Phys. Rev. 118, 626 (1960)

/46/ H. Pfennig und E. Trefftz
Die Druckverbreiterung der diffusen Heliumlinien, Vergleich zwischen Messung und Theorie im quasistatischen Bereich
Z. Naturforsch. 21a, 697 (1966)

/47/ N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller, and E. Teller
Equation of State Calculations by Fast Computing Machines
J. Chem. Phys. 21, 1087 (1953)

/48/ K. Binder
Monte-Carlo Methods in Statistical Physics
Springer-Verlag, Berlin 1979

/49/ R. Bailey
A Study of Monte-Carlo-Techniques used to Determine Electric Microfield Distributions in Plasmas
Thesis, University of Florida, 1968

/50/ A. Gervat and D. Rossignol-Guzzi
Monte-Carlo Study of Stark Fields in Dense Plasmas
Astron. Astrophys. 3, 5 (1969)

/51/ J. Chamayou
Averaging Shifted Histograms
Comput. Phys. Commun. 21, 145 (1980)

/52/ G. Ottersbach
Plasmamikrofeldeigenschaften in Abhängigkeit von der Teilchenzahl N anhand von Computerexperimenten
Verh. DPG (VI) 17, 550 (1982)

/53/ R.W. Larenz
pers. Mitteilung, 1982

/54/ B. Alder and T. Wainwright
Studies in Molecular Dynamics,
I. General Method
J. Chem. Phys. 31, 459 (1959)

/55/ S. von Hoerner
Die numerische Integration des N-Körper-Problems für Sternhaufen
I. Z. Astroph. 50, 184 (1960)
II. Z. Astroph. 57, 47 (1963)

/56/ D. Young and B. Alder
Studies in Molecular Dynamics
XVIII. The Square-Well Phase-Diagram
J. Chem. Phys. 73, 2430 (1980)

/57/ J. Hansen and I. McDonald
Microscopic Simulation of a Strongly Coupled Hydrogen Plasma
Phys. Rev. A 23, 2041 (1981)

/58/ D. Potter
Computational Physics
Wiley, London 1977

/59/ R. Stamm and D. Voslamber
On the Role of Ion Dynamics in the Stark Broadening of Hydrogen Lines
JQSRT 22, 599 (1979)

/60/ G. Ottersbach
Mikroskopische Simulation eines Plasmas zur Bestimmung der Mikrofeldverteilung
Verh. DPG (VI) 15, 776 (1980)

/61/ S. Chandrasekhar and J. von Neumann
The Statistics of the Gravitational Field Arising from a Random Distribution of Stars
I. The Speed of Fluctuations
Ap. J. 95, 489 (1942)
II. The Speed of Fluctuations; Dynamical Friction; Spatial Correlation
Ap. J. 97, 1 (1943)
III. The Correlation in the Force Acting at Two Points Separated by a Finite Distance
Ap. J. 99, 25 (1944)
IV. The Stochastic Variations of the Force Acting on a Star
Ap. J. 99, 47 (1944)

/62/ R. Cohen, L. Spitzer, and P. Routly
The Electrical Conductivity of an Ionized Gas
Phys. Rev. 80, 230 (1950)

/63/ I. Fidone
Correlation du Champ Electrique dans une Plasma
Nuovo Cim. 20, 1219 (1961)

/64/ R.W. Larenz und G. Ottersbach
Computerexperimente zum Plasmamikrofeld
Kleinheubacher Ber. 26, 199 (1983)

/65/ L. Woltz, C. Iglesias, and C. Hooper jr.
Stark-Broadening in Hot, Dense, Laser-Produced Plasmas: A Review
JQSRT 27, 233 (1982)

/66/ W. Oed
Monte Carlo Simulation on Vector Machines
Angew. Inform. 23, 358 (1982)

/67/ D. Fincham and B. Ralston
Molecular Dynamics Simulation Using the Cray-1 Vector Processing Computer
Comput. Phys. Commun. 23, 127 (1981)

/68/ D. Lehmer
Mathematical Methods in Large Scale Computing Units
Ann. Comp. Lab. Harv. Univ.
26, 141 (1951)

/69/ P. Lewis, A. Goodman, and J. Miller
A Pseudo-Random Number Generator for the System /360
IBM Syst. J. 8, 136 (1969)

/70/ Carter Bays and S. Durham
Improving a Poor Random Number Generator
ACM Trans. on Math. Softw. 2, 59 (1976)

/71/ F. Gebhardt
Generating Pseudo-Random Numbers by Shuffling a Fibonacci Sequence
Math. Comp. 21, 708 (1967)

/72/ A. Strecok
On the Calculation of the Inverse of the Error Function
Math. Comp. 22, 144 (1968)

/73/ U. Dieter and J. Ahrens
A Combinatorial Method for the Generation of Normally Distributed Random Numbers
Computing 11, 137 (1973)

Herrn Prof. Dr. R.W. Larenz, Direktor des Instituts für Theoretische Physik der Universität Düsseldorf, danke ich herzlich für die Anregung zu dieser Arbeit, für zahlreiche wertvolle Diskussionen und für die Bereitstellung eines Arbeitsplatzes. Bei Herrn Priv.-Doz. Dr. J. Seidel bedanke ich mich für viele hilfreiche Anregungen auch über größere Entfernung hinweg. Mein Dank gilt weiterhin den Institutsmitgliedern U. Schulte, Dr. H. Wenk und E. Zügge für tatkräftige Unterstützung. Schließlich bin ich den Rechenzentren der Universitäten Düsseldorf und Köln für die Überlassung von Rechenzeit zu Dank verpflichtet.

Am 6. Oktober 1949 wurde ich als erstes Kind des Dipl.-Ing. Paul Ottersbach und seiner Ehefrau Ruth, geb. Hahn, in Düsseldorf geboren.

Ab Ostern 1956 besuchte ich in Düsseldorf und in Hilden die Volksschule. Ostern 1960 wechselte ich in das Städt. Helmholtz-Gymnasium Hilden über und erhielt dort 1968 das Reifezeugnis.

Zum Wintersemester 1968/69 begann ich an der Universität Düsseldorf das Studium der Physik. Für das Studienjahr 1972/73 erhielt ich vom Deutschen Akademischen Austauschdienst und der Stevenson-Foundation ein Stipendium zum Studium an der Universität Glasgow (Schottland). Im Oktober 1976 legte ich an der Universität Düsseldorf die Diplomprüfung in Physik ab, nachdem ich die Diplomarbeit im Institut für Theoretische Physik angefertigt hatte.

Danach war ich zunächst als wissenschaftliche Hilfskraft und ab 1. April 1979 als wissenschaftlicher Assistent am selben Institut tätig.